

МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМЕНИ М. В. ЛОМОНОСОВА

На правах рукописи

Егоренков Владимир Александрович

**Многоэтапный итерационный процесс
для реализации консервативных разностных схем
при моделировании 2D и 3D полупроводниковой плазмы, индуцированной
оптическим импульсом.**

Специальность 1.2.2

«Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ»

**Диссертация на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук**

Научный руководитель:
кандидат физико-математических наук
Логинова Мария Михайловна

Москва — 2023

Оглавление

Введение	7
Глава 1. Постановка некоторых задач распространения оптического импульса в полупроводнике	21
§1.1. Постановка 2D задачи распространения оптического импульса в полупроводнике.....	21
1.1.1. Постановка 2D задачи взаимодействия оптического импульса с полупроводником без учета дифракционных эффектов	22
1.1.2. Математическая модель распространения оптического импульса в полупроводнике с учетом продольной дифракции	24
1.1.3. Задачи нахождения начальных распределений функций	26
1.1.4. Связь между законом сохранения заряда и разрешимостью задачи Неймана	28
§1.2. Постановка 3D задачи распространения оптического импульса в полупроводнике.....	29
1.2.1. Постановка 3D задачи взаимодействия оптического импульса с полупроводником без учета дифракционных эффектов	30
1.2.2. Задача распространения оптического импульса в полупроводнике с учетом продольной дифракции в 3D случае	31
1.2.3. Задачи нахождения начальных распределений функций	32
§1.3. Множественность решений рассматриваемых задач при постановке граничных условий Неймана для потенциала электрического поля. Условия выделения единственного решения	35
1.3.1. Полевая модель оптической бистабильности	36
1.3.2. Концентрационная модель оптической бистабильности	37
1.3.3. Выбор условия выделения единственного решения для задачи нахождения начального распределения характеристик полупроводника	37
§1.4. Некоторые аналитические оценки решения 2D задач воздействия оптического импульса на полупроводник.....	40
1.4.1 Положительность и ограниченность концентрации ионизированных доноров.....	40
1.4.2 Ограниченность концентрации свободных электронов в норме L_1	41
1.4.3 Существование решения уравнения относительно концентрации свободных электронов	42
1.4.4 Некоторые оценки для потенциала электрического поля.....	43
1.4.5 Ограниченность коэффициента поглощения оптической энергии	45
1.4.6 Условия существования оптической бистабильности	46
1.4.7 Оценка решения уравнения Шредингера	49
1.4.8 Ускорение оптического импульса при учете его отражения от поверхности полупроводника	50
1.4.9 Третий инвариант (Гамильтониан) для уравнения Шредингера	52
§1.5. Краткие выводы	55

Глава 2. Разностные схемы для поставленных задач взаимодействия оптического импульса с полупроводником	56
§2.1. Консервативные разностные схемы для 2D задачи распространения оптического импульса в полупроводнике	56
2.1.1. Разностная схема для 2D задачи распространения оптического импульса в полупроводнике без учета продольной дифракции	56
2.1.2. Разностная схема для 2D задачи распространения оптического импульса в полупроводнике с учетом продольной дифракции	59
2.1.3. Исследование порядка аппроксимации и консервативности 2D разностной схемы ...	60
§2.2. Некоторые оценки разностного решения 2D задачи взаимодействия оптического импульса с полупроводником	64
2.2.1. Положительность сеточной функции концентрации ионизированных доноров	64
2.2.2. Ограниченность сеточной функции концентрации ионизированных доноров	65
2.2.3. Оценка сеточной функции амплитуды оптического импульса в норме L_2	66
§2.3. Консервативная разностная схема для 3D задачи распространения оптического импульса в полупроводнике	67
2.3.1. Разностная схема для 3D задачи распространения оптического импульса в полупроводнике	67
2.3.2. Исследование порядка аппроксимации и консервативности 3D разностной схемы ...	69
§2.4. Методы реализации разностных схем для рассмотренных 2D задач	70
2.4.1. Двухэтапный итерационный процесс, реализующий консервативную разностную схему для 2D нестационарных задач	71
2.4.2. Исследование консервативности на итерациях для 2D разностной схемы	74
2.4.3. Метод расщепления для 2D задачи взаимодействия оптического импульса с полупроводником	76
2.4.4. Модифицированный метод расщепления для 2D задачи взаимодействия оптического импульса с полупроводником	77
2.4.5. Исследование консервативности для 2D методов расщепления	79
§2.5. Некоторые оценки для сеточных функций на итерациях	81
2.5.1. Положительность и ограниченность сеточной функции концентрации ионизированных доноров на итерациях	82
2.5.2. Однородная ограниченность сеточной функции концентрации ионизированных доноров на итерациях	83
2.5.3. Ограниченность разности значений сеточной функции концентрации ионизированных доноров, полученных на соседних итерациях	84
2.5.4. Равномерная ограниченность сеточной функции концентрации свободных электронов на итерациях в норме L_1	85
2.5.5. Ограниченность разности значений сеточной функции концентрации ионизированных доноров, полученных на соседних итерациях	87

2.5.6. Равномерная ограниченность сеточной функции комплексной амплитуды на итерациях в норме C	88
2.5.7. Ограниченность разности значений сеточной функции комплексной амплитуды оптического импульса, полученных на итерациях	90
2.5.8. Сходимость двухэтапного итерационного процесса	91
§2.6. Методы реализации разностных схем для рассмотренной 3D задачи	92
2.6.1. Трехэтапный итерационный процесс, реализующий консервативную разностную схему для 3D нестационарных задач	92
2.6.2. Исследование консервативности на итерациях для ТЭИП	95
2.6.3. Модифицированный метод стабилизирующей поправки для 3D задачи взаимодействия оптического импульса с полупроводником	98
§2.7. Разностные схемы для задачи нахождения начальных распределений характеристик полупроводника	106
2.7.1. Разностные схемы для задачи нахождения начального распределения характеристик полупроводника в 2D случае при воздействии внешнего электрического поля	106
2.7.2. Разностная схема для задачи нахождения начального распределения характеристик полупроводника в 3D случае при воздействии внешнего электрического поля по всем осям координат	108
2.7.3. Разностные схемы для задачи нахождения начального распределения характеристик полупроводника в 3D случае при воздействии электрического поля по одной или двум координатам	111
§2.8. Численные методы решения задачи Неймана для уравнения Пуассона	112
2.8.1. Прямой метод решения 2D и 3D задачи Неймана для уравнения Пуассона	113
2.8.2. Итерационные методы решения 2D и 3D задачи Неймана для уравнения Пуассона (метод переменных направлений и метод стабилизирующей поправки)	114
2.8.3. Алгоритмы выделения единственного решения при численном решении задачи Неймана	117
§2.9. Программный комплекс для компьютерного моделирования задачи распространения оптического импульса в полупроводнике	118
2.9.1. Вычислительный комплекс	118
2.9.2. Средства визуализации и обработки информации	122
§2.10. Краткие выводы	123
Глава 3. Численное исследование эффективности построенных разностных схем для решения задачи взаимодействия оптического импульса с полупроводником	124
§3.1. Сравнение эффективности разностных схем для решения 2D задачи генерации полупроводниковой плазмы	124
3.1.1. Численное исследование консервативности построенных разностных схем на основе компьютерного моделирования	125

3.1.2. Исследование асимптотической устойчивости разностных схем и сохранение симметричности начального распределения функций на основе компьютерного моделирования	126
3.1.3. Влияние точности вычисления потенциала электрического поля на решение нестационарной задачи генерации полупроводниковой плазмы. Выбор критерия сходимости итерационного процесса	128
§3.2. Исследование влияния точности вычисления начального распределения характеристик полупроводника и выбора нормировки потенциала лазеро-индуцированного поля на численное решение рассматриваемых задач	132
3.2.1. Влияние точности вычисления начального распределения характеристик полупроводника на решение нестационарной задачи генерации полупроводниковой плазмы	132
3.2.2 Влияние нормировки потенциала на численное решение задачи полевой оптической бистабильности	134
§3.3. О нарушении условия разрешимости при решении прямыми методами задачи Неймана для уравнения Пуассона, включенного в систему нестационарных дифференциальных уравнений и нелинейно связанного с уравнением типа реакция-конвекция-диффузия. Преимущества применения итерационных методов.....	141
3.3.1. Случай однородных граничных условий	143
3.3.2. Асимптотическая устойчивость разностных решений	146
3.3.3. Случай неоднородных граничных условий.....	149
§3.4. Краткие выводы	158
Глава 4. Компьютерное моделирование нелинейного взаимодействия оптического излучения с полупроводником.....	160
§4.1. Компьютерное моделирование оптической бистабильности. Построение гистерезисных зависимостей характеристик полупроводника от входной интенсивности оптического импульса.....	160
4.1.1. Построение гистерезисной петли для полевой модели в 2D случае	160
4.1.2. Влияние длительности оптического импульса на формирование гистерезисной петли	163
4.1.3. Построение гистерезисной петли для концентрационной модели оптической бистабильности в 2D случае	167
4.1.4. Компьютерное моделирование волн переключения и их регистрация по выходному излучению.....	169
§4.2. Спиральные волны концентрации свободных электронов, индуцированные оптическим излучением в 2D полупроводнике, находящимся во внешнем электрическом поле	171
4.2.1. Влияние внешнего электрического поля, действующего в направлении поперечном к направлению распространения оптического излучения, на формирование волн переключения в полупроводнике	172
4.2.2. Влияние внешнего электрического поля, действующего вдоль направления распространения оптического излучения, на формирование волн переключения в полупроводнике	176

4.2.3. Влияние неоднородного внешнего электрического поля на формирование волн переключения в полупроводнике	179
4.2.4 Влияние коэффициента подвижности электронов на формирование волн переключения в полупроводнике	181
§4.3. Компьютерное моделирование 3D пространственно-временных структур, реализующихся в полупроводнике под воздействием оптического импульса	183
§4.4. Роль продольной дифракции при формировании контрастных структур полупроводниках: нелинейная градиентная оптика	187
4.4.1. Отражение оптического импульса от фиксированного домена высокого поглощения	188
4.4.2. Отражение оптического импульса от домена высокого поглощения, индуцированного им же	190
§4.5. Краткие выводы	196
Заключение	198
Список литературы.....	199
Список публикаций автора по теме диссертации	215

Введение

С момента появления первых лазеров в 1960-х годах исследование нелинейных волновых оптических процессов в различных средах приобрело особую научную и прикладную значимость. На протяжении последних десятилетий нелинейная оптика и лазерная физика являются одними из важнейших направлений в современной науке, привлекающих внимание многих ученых [1-19]. Исследования в этих областях касаются широкого спектра задач, в том числе возможности управления светом с помощью света [18-22], что составляет предмет фотоники. Актуальной научно-технической проблемой является вопрос перехода к полностью оптическим технологиям обработки, хранения и передачи информации. Во всем мире огромное внимание уделяется построению ультрабыстрого оптического переключателя [23-28] и полностью оптического компьютера в перспективе.

Реализация этих технологий основана на явлении оптической бистабильности (ОБ), которое заключается в существовании двух устойчивых значений выходной интенсивности, соответствующих одному значению входной интенсивности распространяющегося оптического пучка [18, 20, 29-56]. Таким образом, в системе среда - оптическое излучение возникает гистерезисная зависимость характеристик среды от входной интенсивности падающего излучения. Необходимым условием возникновения ОБ является нелинейный отклик среды. Очевидно, что для обеспечения надежности оптического переключателя и оптической обработки данных, необходимо детальное изучение условий реализации ОБ, устойчивости ее состояний, контрастности переключения, энергии переключения. ОБ схемы, основанные, в частности, на нелинейных свойствах полупроводников [57], являются на сегодняшний день одними из самых распространенных [23-25, 29, 40-46].

В настоящее время продолжают обширные экспериментальные, теоретические и численные исследования явления ОБ, результаты которых представлены в многочисленных работах [58-74], и они далеки от окончательного решения. Поиск новых физических механизмов, на основе которых можно создать надежный ОБ элемент, характеристики которого существенно превышали бы характеристики соответствующих электронных аналогов, остается актуальной проблемой, также, как и изучение влияния различных физических факторов на уже известные схемы реализации ОБ, в частности, основанные на возрастающем поглощении. Такой тип ОБ называется абсорбционной ОБ, так как в этом случае коэффициент поглощения нелинейно зависит от характеристик полупроводника. В представленной диссертации изучается именно этот тип ОБ, реализующийся при воздействии оптического импульса на полупроводник.

Отметим, что в [75-80] предложен и исследован одномерный случай абсорбционной ОБ, основанной на нелинейной зависимости коэффициента поглощения от лазеро-индуцированного электрического поля полупроводника (полевая абсорбционная ОБ), а также анализировалась ОБ на основе зависимости коэффициента поглощения от концентрации свободных электронов (концентрационная абсорбционная ОБ) с учетом влияния лазеро-индуцированного электрического поля. В данных работах были продемонстрированы следующие явления: возможность реализации при определенных условиях полевой абсорбционной ОБ, аномальное влияние диффузии электронов на характеристики схемы полевой абсорбционной ОБ, различные режимы развития пространственно–временных осцилляций концентраций заряженных частиц в оптически тонком слое, учет которых позволяет повысить надежность оптических переключателей. При этом учитывался сдвиг энергетических уровней атомов и молекул [4, 81-82], реализующийся в электромагнитном поле высокоинтенсивных лазерных импульсов. Важно подчеркнуть, что рассматриваемые в диссертации 2D и 3D задачи данного типа ранее не были исследованы.

Принципиальное значение для формирования волн переключения в абсорбционных ОБ системах играет поперечная и продольная дифракции оптического пучка. Так, в [83-96] представлены результаты исследования влияния дифракции оптического пучка в направлении, перпендикулярном распространению пучка (поперечная дифракция). Учет продольной дифракции светового пучка (т. е. действующей вдоль направления распространения импульса) при формировании волн переключения в ОБ системе на основе возрастающего поглощения ранее не проводился и, следовательно, является актуальной задачей.

Как известно, в ОБ системе на основе нелинейного поглощения могут формироваться домены высокого поглощения, которые характеризуются высокой концентрацией свободных электронов и ионизированных доноров, то есть появляются контрастные структуры и сильный градиент коэффициента поглощения и, например концентрации электронов. Из оптики известно [97], что градиент показателя преломления (например, из-за изменения концентрации свободных электронов) или коэффициента поглощения вещества приводит к появлению отраженной волны от границы, на которой имеет место данный градиент. Поэтому часть оптического излучения отражается от границы контрастной структуры, и распространяется в направлении, противоположном направлению распространения падающего излучения. Для учета отраженной волны надо принимать во внимание дифракцию оптического пучка вдоль координаты его распространения, что ранее другими авторами не проводилось. Математически это означает отказ от традиционно используемого в нелинейной оптике приближения медленно изменяющейся амплитуды по координате распространения оптического излучения. Такие задачи

относятся к новому направлению – нелинейной градиентной оптике. Заметим, что термин “градиентная оптика” (в среде присутствуют продольные неоднородности показателя преломления) был, по-видимому, впервые введен А.Б. Шварцбургом применительно к неоднородным средам [98-102]. Важно подчеркнуть, что в исследуемом случае, градиент характеристик среды индуцируется самим падающим излучением из-за возрастающего поглощения и на нем же происходит отражение излучения.

Исследуемая в работе математическая модель абсорбционной ОБ представляет собой начально-краевую задачу и описывается системой нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных с нелинейной обратной связью [4, 20, 34, 103]. Данная система состоит из уравнений, записанных относительно концентраций заряженных частиц; уравнения Пуассона, записанного относительно лазеро-индуцированного электрического поля полупроводника и уравнения, описывающего изменение характеристик оптического пучка при распространении в нелинейной среде. Задаются начальные и граничные условия. В частности, для уравнения Пуассона ставится задача Неймана. Изменение концентрации свободных электронов полупроводника описывается нелинейным нестационарным уравнением типа реакция-конвекция-диффузия. В слагаемое, описывающее конвективный перенос, входит параметр, описывающий подвижность электронов и определяющий взаимное влияние между концентрацией свободных электронов и потенциалом лазеро-индуцированного электрического поля полупроводника. Учитывается также генерация и рекомбинация электронов. Изменение концентрации ионизированных доноров описывается нестационарным уравнением, учитывающем их генерацию с учетом возрастающего поглощения и их рекомбинацию.

Эволюция оптического импульса описывается либо уравнением переноса относительно его интенсивности (ранее в литературе, как правило, рассматривалось именно оно), либо нелинейным уравнением Шредингера относительно его комплексной амплитуды, с учетом «продольной» и «поперечной» дифракций. Как было отмечено выше, математически учет отражения оптического импульса от индуцированной границы достигается отказом от принятого в нелинейной оптике приближения медленно изменяющейся амплитуды вдоль координаты его распространения. Следовательно, уравнение Шредингера будет содержать дополнительно вторую производную по соответствующей координате. Данное рассмотрение может играть принципиальную роль при реализации продольных кинков в случае абсорбционной ОБ, а также для моделирования взаимодействия падающей и отраженной волны. Учет продольной дифракции применительно к задачам распространения оптических импульсов в фотонных кристаллах были рассмотрены в работах [104-105].

Очевидно, что для исследования таких сложных динамических процессов широкое распространение получило компьютерное моделирование. Это в свою очередь, потребовало разработки эффективных численных алгоритмов, учитывающих специфику рассматриваемых задач. Конечно-разностный метод [106-115] является одним из наиболее распространенных численных подходов, особенно при решении задач в областях простой геометрии (в диссертации рассматриваются задачи именно в таких областях: прямоугольнике или параллелепипеде). Одним из важнейших свойств конечно-разностной схемы примененной для решения стационарных и нестационарных задач математической физики является ее консервативность [116]. Консервативность означает, что разностная схема выражает некоторый физический закон сохранения (уравнение баланса) на сетке [106]. Для построения консервативных конечно-разностных схем в литературе был предложен метод баланса (интегро-интерполяционный метод) [106-107].

На практике, для решения нестационарных многомерных уравнений в частных производных необходимо применять экономичные конечно-разностные схемы, то есть требующих минимума арифметических действия при решении разностных уравнений. «Требование экономичности применительно к нестационарным задачам математической физики обычно означает, что число арифметических действий, затрачиваемых для решения разностных уравнений при переходе со слоя на слой, пропорционально числу узлов сетки» [106]. Для построения таких схем применяется общий принцип: решение сложной задачи сводится к цепочке простых с помощью введения промежуточных временных слоев [117-148], на каждом из которых простая (одномерная) задача может быть решена каким-либо экономичным методом, например, методом прогонки [106, 108, 111]. В отечественной литературе такой подход принято называть методами расщепления [122], аддитивными схемами [106, 134-135], локально-одномерными схемами или методом дробных шагов [121]. В представленной диссертации будем использовать термин – методы расщепления. Отметим, что в литературе подчеркивается принципиальное отличие при построении таких схем для 2D и 3D задач.

Первые экономичные схемы (alternating-direction implicit method) были предложены в работах [117-118], в которых для приближенного решения двухмерных параболических и эллиптических задач построены абсолютно устойчивые, экономичные схемы, обладающие вторым порядком аппроксимации по времени и пространству. Для этого оператор двухмерной задачи расщеплялся на сумму одномерных операторов и переход на новый временной слой осуществлялся в два шага с использованием промежуточного временного слоя. В отечественной литературе данный метод называют методом переменных направлений или продольно-поперечной прогонкой.

Важно отметить, что метод переменных направлений не имеет непосредственного обобщения на многомерный случай: при трех пространственных переменных метод становится неустойчивым. В работе [119] был предложен безусловно устойчивый метод для численного решения трехмерного уравнения теплопроводности, но обладающий только первым порядком точности по времени. Позднее в [120] была предложена модифицированная схема, обладающая вторым порядком точности как в двумерном, так и в трехмерном случаях, называемая также схемой Дугласа. В основе метода лежит следующая идея согласно интерпретации работы [121, с.31]: на первом дробном шаге решается уравнение, дающее полную аппроксимацию уравнения теплопроводности, следующие дробные шаги являются поправочными и повышают устойчивость схемы. В отечественной литературе эти разностные схемы принято называть методом стабилизации или методом стабилизирующей поправки или схемой с поправкой на устойчивость [106, 121-122].

В настоящее время метод стабилизирующей поправки (метод Дугласа) и его многочисленные модификации не потеряли своей актуальности [138-147] и являются основным подходом, при решении многомерных нестационарных нелинейных уравнений или систем из таких уравнений [148]. Отметим также, что численное моделирование нелинейного уравнения Шредингера, входящего в рассматриваемую систему уравнений, представляет собой отдельную задачу, для решения которой в литературе предложены многочисленные подходы [149-178].

На практике использование методов расщепления для решения нестационарных нелинейных задач приводит к искажению численного решения при расчете на больших временных интервалах, в то время как на небольших интервалах метод позволяет найти решение с высокой точностью. То есть для таких задач методы расщепления не обладают свойством асимптотической устойчивости. Также заметим, что при использовании методов расщепления для достижения требуемой точности решения задачи при увеличении временного интервала необходимо уменьшать шаг по времени, что существенно влияет на вычислительную стоимость компьютерного моделирования. В связи с указанными недостатками методов расщепления разработка альтернативных разностных схем, свободных от этих недостатков, является актуальной задачей.

Одним из возможных способов достижения этой цели является применение консервативных нелинейных разностных схем и их реализация с помощью итерационных процессов [108, 179-181]. Для рассматриваемого класса задач в [182-183] были продемонстрированы их преимущества при анализе нелинейных одномерных задач.

В настоящей диссертации для рассматриваемой задачи построен оригинальный многоэтапный итерационный процесс, реализующий нелинейную консервативную разностную схему. Он строится таким образом, чтобы, как и в случае метода расщепления, метод был экономичен: на каждой итерации решается одномерная подзадача. Основное отличие предлагаемой разностной схемы с использованием итерационного процесса от методов расщепления заключается в отсутствии промежуточных временных слоев: при решении уравнений на верхнем слое используются значения как с предыдущего слоя, так и с предыдущих итераций на верхнем слое. Этим достигается консервативность схемы на временных слоях. Более того, удастся реализовать консервативность конечно-разностной схемы на итерациях, что существенно увеличивает преимущество такого подхода. В отличие от методов расщепления, в случае применения итерационного процесса при увеличении расчетного интервала по времени не требуется уменьшения шагов сетки. Это, в свою очередь, является принципиальным фактором при моделировании многомерных нестационарных задач. Таким образом, разрабатываемый подход является альтернативой методу стабилизирующей поправки (методу Дугласа) при решении 3D нелинейных задач.

Рассматриваемая система уравнений содержит уравнение Пуассона с граничными условиями Неймана, поставленная в прямоугольной области. Для его численного решения в литературе применяются либо итерационные методы, основанные на использовании методов расщепления, например метод переменных направлений, метод стабилизирующей поправки, метод предиктор-корректор [109, 111, 120-121, 125, 132], либо прямые методы, наиболее популярным из которых является метод быстрого дискретного преобразования Фурье (БДПФ), впервые предложенный в работах [184-185]. Благодаря высокой точности и быстродействию этот алгоритм стал основным инструментом решения эллиптических уравнений в областях простой геометрии [186-198]. Он реализован в различных коммерческих пакетах, таких, например, как Intel MKL, MATLAB, Wolfram Mathematica [199-201]. Однако, в рассматриваемой в диссертации задаче уравнение Пуассона решается совместно с уравнением типа реакция-конвекция-диффузия относительно концентрации свободных электронов, в котором учитывается их подвижность. В литературе отсутствуют исследования эффективности применения прямых методов (в том числе БДПФ) к решению такой задачи. В диссертации этот пробел восполнен. Было обнаружено, что использование прямых методов для таких задач неэффективно: происходит быстрое накопление вычислительной погрешности, что приводит к нарушению условия разрешимости задачи Неймана [106, 202-204], которое для рассматриваемой задачи совпадает с условием консервативности метода. Как следствие, происходит существенное искажение численного решения. В то же время итерационные методы (метод переменных направлений в двумерном

случае и метод стабилизации в трехмерном случае, а также развиваемый в работе метод, основанный на нелинейных консервативных схемах с использованием итерационного процесса) обеспечивают выполнение условия разрешимости, и соответственно консервативности, рассматриваемой задачи. Предложенный в работе подход к решению систем нелинейных дифференциальных уравнений может быть применен к задачам в различных научных областях, например при моделировании задач хемотаксиса [205-209].

Цели и задачи. Основной целью работы является разработка оригинального многоэтапного итерационного процесса для реализации консервативных разностных схем при моделировании 2D и 3D задач генерации полупроводниковой плазмы; демонстрация его преимуществ по сравнению с известными в литературе методами; проведение исследования процессов, происходящих в полупроводнике под действием интенсивного оптического импульса на основе компьютерного моделирования.

Для достижения поставленной цели необходимо было решить следующие задачи:

1. Для исследуемой задачи записать консервативную разностную схему и построить многоэтапный итерационный процесс для ее реализации. Провести аналитическое и численное исследование точности и работоспособности предложенного подхода.

2. Построить новую модель взаимодействия светового импульса с полупроводником, учитывающей отражение падающей волны от границ индуцированных ей же контрастных динамических структур. Для этого в систему уравнений вводится нелинейное уравнение Шредингера, записанное относительно комплексной амплитуды падающего импульса с учетом его продольной дифракции.

3. Разработать программный комплекс, реализующий предложенные в работе численные подходы к решению задачи генерации полупроводниковой плазмы, позволяющий проводить исследование эффективности и сравнения численных методов по различным критериям.

4. Провести компьютерные эксперименты процесса генерации лазеро-индуцированной полупроводниковой плазмы для 2D и 3D случаев; продемонстрировать возможность реализации абсорбционной ОБ; изучить влияние параметров системы на режимы изменения характеристик полупроводника; изучить влияние учета волны, отраженной от лазеро-индуцированного домена высокого поглощения.

Объектом исследования является система нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных, описывающая процесс генерации полупроводниковой плазмы, индуцированной оптическим импульсом. **Предметом исследования** являются численные

методы для решения рассматриваемой задачи и нелинейные явления, происходящие в полупроводнике под действием оптического импульса.

Научная новизна.

1. Для задачи взаимодействия оптического импульса с полупроводником в 2D и 3D постановках предложен оригинальный многостадийный итерационный процесс позволяющий реализовывать экономичные консервативные разностные схемы и обладающий асимптотической устойчивостью и консервативностью на итерациях. Продемонстрированы преимущества данного подхода перед широко используемыми методами расщепления.

2. Разработан итерационный метод, обладающий консервативностью на итерациях, для нахождения начального распределения характеристик полупроводника при воздействии на него внешнего электрического поля (случай постановки неоднородных граничных условий).

3. Проведено сравнение эффективности численных подходов для решения 3D уравнения Пуассона с граничными условиями Неймана, включенного в систему нестационарных дифференциальных уравнений и нелинейно связанного с уравнением типа реакция-конвекция-диффузия, записанного относительно концентрации свободных электронов, в котором учитывается их подвижность. Продемонстрировано, что несмотря на повсеместное использование БДФ для решения эллиптических задач в прямоугольных областях, применение прямых методов для рассматриваемой в работе задачи приводит к нарушению условия разрешимости задачи Неймана и искажению полученного решения.

4. Предложена новая математическая модель взаимодействия оптического импульса с полупроводником, учитывающая продольную дифракцию оптического пучка. Это позволило продемонстрировать отражение части падающей волны от индуцированной ею же контрастной структуры в полупроводнике.

5. Показана возможность реализации S - и N -образных гистерезисных зависимостей концентрации свободных носителей заряда полупроводника от входной интенсивности падающего оптического импульса при его прохождении через полупроводник.

6. В условиях существования оптической бистабильности обнаружен режим формирования спиральных волн концентрации свободных электронов полупроводника при его нахождении во внешнем электрическом поле.

Теоретическая и практическая значимость.

1. Предложенный многостадийный итерационный процесс является надежным и эффективным численным методом, обладающим консервативностью и асимптотической устойчивостью. Он может быть применен для реализации экономичных консервативных

разностных схем, построенных для различных систем нелинейных многомерных уравнений (или одного уравнения). Следует подчеркнуть, что разработанный в работе итерационный метод может иметь широкое применение и в других научных областях для задач, описываемых подобными системами уравнений.

2. Выявлено принципиальное ограничение в использовании прямых численных методов для решения задачи Неймана для уравнения Пуассона, включенного в систему нестационарных дифференциальных уравнений и нелинейно связанного с уравнением типа реакция-конвекция-диффузия. Его необходимо учитывать при решении подобных систем дифференциальных уравнений, описывающих процессы из других областей науки, например в физике плазмы, задачах хемотаксиса.

3. Для обеспечения надежности ОБ элементов необходимо учитывать отражение оптического импульса от границы лазеро-индуцированного домена высокого поглощения, формирующегося в полупроводнике.

4. Обнаруженные спиральные волны концентрации свободных электронов, формирующиеся в полупроводнике под воздействием оптического импульса в условиях присутствия внешнего электрического поля, должны учитываться при построении электронно-оптических переключателей и в системах обработки информации оптическими методами.

Методы исследования. В работе используются методы теории дифференциальных уравнений, методы вычислительной математики и компьютерного моделирования.

Положения, выносимые на защиту.

1. Многоэтапный итерационный процесс, который наряду с методами расщепления является экономичным, но обладает асимптотической устойчивостью, реализующий консервативные разностные схемы для решения многомерных задач нелинейного взаимодействия оптического импульса с полупроводником. Доказательство его консервативности, включая консервативность на итерациях.

2. Преимущество применения итерационных методов при реализации консервативных разностных схем, аппроксимирующих систему нелинейных дифференциальных уравнений, описывающих генерацию лазеро-индуцированной полупроводниковой плазмы, для решения входящей в нее разностной задачи Неймана для уравнения Пуассона, которые, в отличие от прямых методов, обеспечивают выполнение условия разрешимости задачи Неймана.

3. Результаты комплексных исследований, проведенных на основе разработанного комплекса программ, по математическому моделированию сложных динамических нелинейных

процессов, включающих, в частности, формирование контрастных пространственно-временных структур в полупроводнике под действием оптического излучения.

4. Обоснование на основе математического моделирования фундаментальной роли продольной дифракции светового пучка при его нелинейном распространении в среде в случае формирования лазеро-индуцированных контрастных пространственно-временных структур.

Апробация результатов. Основные результаты диссертации докладывались на 25 Российских и международных конференциях:

- “International Conference on Computational and Mathematical Methods in Science and Engineering, CMMSE” (Almeria, Spain, 23-27 июня 2013; Costa Ballena, Cadiz, Spain, 4-8 июля 2017; Rota, Cadiz, Spain, 9-13 июля 2018, 30 июня - 6 июля 2019).

- “International Conference on Advanced Optoelectronics and Lasers, CAOL” (Sudak, Ukraine, 9-13 сентября 2013).

- “The 10th and the 11th AIMS Conference on Dynamical Systems, Differential Equations and Applications” (Madrid, Spain, 7-11 июля 2014; Orlando, Florida, USA, 1-5 июля 2016).

- “SPIE Photonic Europe” (Brussels, Belgium, 13-17 апреля 2014).

- “SPIE Optics + Photonics” (San Diego, California, USA, 17-21 августа 2014, 9-13 августа 2015, 19-23 августа 2018).

- “Seventeenth International Conference on Computational Methods and Experimental Measurements” (Opatija, Croatia, 5-7 мая 2015).

- “8th international congress on industrial and applied mathematics, ICIAM” (Beijing, China, 10-14 августа 2015).

- “Тихоновские чтения” (Москва, МГУ имени М.В. Ломоносова, факультет ВМК, Россия, 26-29 октября 2015, 23-27 октября 2017, 29 октября – 1 ноября 2018, 29 октября – 1 ноября 2019).

- “Sixth Conference on Numerical Analysis and Applications, NAA'16” (Lozenetz, Bulgaria, 15-20 июня 2016).

- “Современные проблемы математической физики и вычислительной математики” (Москва, Россия, 31 октября - 3 ноября 2016).

- “Ломоносовские чтения” (Москва, МГУ имени М. В. Ломоносова, Россия, 17-26 апреля 2017, 15-25 апреля 2019).

- “Frontiers in Optics” (Washington DC, USA, 17-21 сентября 2017).

- “SPIE Photonics West” (San Francisco, USA, 27 января - 1 февраля 2018).
- “International Conference on Ultrafast Optical Science “UltrafastLight-2019” (Москва, Lebedev Physical Institute, Россия, 30 сентября - 4 октября 2019).
- “Квантовая информатика 2021” (Москва, Россия, 30 марта - 4 апреля 2021).
- “SPIE Optics + Photonics” (San Diego, California, USA, 25-29 августа 2013).

Отдельные результаты работы докладывались на научном семинаре лаборатории математического моделирования в физике факультета вычислительной математики и кибернетики МГУ имени М.В. Ломоносова.

Достоверность результатов. Работоспособность и эффективность представленных численных методов демонстрируется в численных экспериментах и обосновывается согласованностью выводов аналитического исследования и численного моделирования; непротиворечивостью имеющимся в литературе результатам; сопоставлением полученных результатов с имеющимися аналитическими решениями; выполнением разностных аналогов законов сохранения дифференциальных задач на решении разностных задач и проведении расчетов на сгущающихся сетках. Для некоторых частных постановок задачи корректность модели подтверждена строгими математическими результатами, оформленными в виде сформулированных и доказанных теорем

Публикации. Основные результаты работы представлены в восемнадцати публикациях [A1-A18], из них четырнадцать [A1-A14] в изданиях, индексируемых в Web of Science Core Collection, Scopus и РИНЦ, в том числе три статьи в журналах, входящих в Q1 [A9 - A11]; еще три работы [A16-A18] опубликованы в изданиях, индексируемых в РИНЦ.

Личный вклад автора. Все представленные в диссертации результаты получены лично автором под научным руководством к.ф.-м.н. М. М. Логиновой и при научном консультировании д.ф.-м.н., проф. В. А. Трофимова. Во всех совместных работах использовался разработанный автором многоэтапный итерационный процесс, реализующий консервативную разностную схему, записанную для задачи генерации полупроводниковой плазмы под действием оптического импульса. Все используемые в ходе исследований численные алгоритмы, за исключением быстрого дискретного преобразования Фурье, были реализованы автором в виде программного комплекса, проведено компьютерное моделирование, визуализация и описание результатов численных экспериментов. Анализ полученных результатов проводился автором с частичной помощью соавторов, при этом вклад автора был определяющим. Соавторы помогали автору с редактурой текста и его переводом на английский язык. В работах [A1-A3] автором проводились

вычисления и анализ результатов для 2D случая (результаты исследования 1D случая проводились М. М. Логиновой). В работах [A7, A8, A12, A14] автором была предложена и исследована новая математическая модель взаимодействия оптического импульса с полупроводником, учитывающая продольную дифракцию оптического пучка. В статьях [A7, A12] автором было проведено аналитическое исследование рассматриваемой системы уравнений в дифференциальной и разностной формах (показаны ограниченность функций, консервативность разностной схемы, сходимость итерационного процесса и т. д.). В работе [A9] автором проведено исследование по выбору оптимально критерия сходимости итерационного процесса при решении 2D уравнения Пуассона. В работе [A10] для численного решения задачи оптической бистабильности автором предложены алгоритмы нормировки численного решения.

Структура работы. Работа состоит из введения, четырех глав, заключения, списка литературы и списка публикаций автора по теме диссертации. Общий объём работы составляет 216 страниц, включая 66 рисунков и 5 таблиц. Список литературы содержит 221 наименование.

В первой главе будут сформулированы 2D и 3D постановки задачи взаимодействия оптического импульса с полупроводником. Математическая модель данного процесса представляет собой системы безразмерных дифференциальных уравнений в частных производных с соответствующими начальными и граничными условиями. Будут рассмотрены случаи постановок однородных и неоднородных граничных условий, описывающих отсутствие или присутствие воздействия внешнего электрического поля на полупроводник, соответственно, а также сформулированы задачи нахождения начальных распределений характеристик полупроводника. Будут рассмотрены различные критерии выделения единственного решения для уравнения Пуассона с краевыми условиями задачи Неймана, входящего в систему нелинейных нестационарных дифференциальных уравнений.

Будет предложена новая математическая модель, учитывающая дифракцию падающего оптического излучения вдоль координаты его распространения. В этом случае эволюция оптического импульса, распространяющегося в полупроводнике, описывается нелинейным уравнением Шредингера, записанным относительно его комплексной амплитуды, медленно изменяющейся по временной и поперечной координатам и быстро изменяющейся по продольной координате.

Будут получены некоторые аналитические оценки для решения 2D задачи воздействия оптического импульса на полупроводник в случае постановки однородных граничных условий: показана ограниченность концентраций заряженных частиц, потенциала электрического поля и коэффициента поглощения. Для уравнения Шредингера будут получены интегральные соотношения и показано, что энергия импульса уменьшается со временем, но всегда остается

положительной, учет отражения части импульса от поверхности полупроводника приводит к ускорению распространения импульса, а изменение фазы импульса ограничено в нормах L_2 и C .

Во второй главе будут построены консервативные конечно-разностные схемы для 2D и 3D задач взаимодействия оптического импульса с полупроводником. Для их реализации будет разработан новый многоэтапный итерационный процесс. Будут сформулированы и доказаны теоремы о консервативности схем и их консервативности на итерациях, исследован порядок аппроксимации. Будет доказана равномерная ограниченность для разностного решения, полученного с использованием двухэтапного итерационного процесса (ДЭИП) и сходимость самого итерационного процесса. Для анализа эффективности предложенного в диссертации многоэтапного итерационного процесса для рассматриваемой задачи, в работе будут записаны схемы на основе широко применяемого метода расщепления и исследованы их свойства. Кроме этого, будут построены разностные схемы для нахождения начального распределения характеристик полупроводника, находящегося во внешнем электрическом поле.

Для решения задачи Неймана для уравнения Пуассона будет исследован вопрос применения прямых и итерационных методов и продемонстрирована связь разрешимости задачи с консервативностью конечно-разностной схемы для рассматриваемой задачи.

Кроме этого, в данной главе будет описан разработанный программный комплекс для проведения компьютерного моделирования рассматриваемых задач и средства визуализации полученных результатов.

В третьей главе будут представлены результаты исследования эффективности и применимости численных методов, представленных в главе 2, для решения задачи генерации нестационарной полупроводниковой плазмы. В частности, будет проведено сравнение эффективности методов расщепления и нового итерационного процесса для решения рассматриваемых 2D и 3D задач и продемонстрировано преимущество последнего.

Будет рассмотрен вопрос о влиянии точности нахождения начальных распределений характеристик полупроводника на решение эволюционной системы; продемонстрировано влияние нормировки решения задачи Неймана для уравнения Пуассона при решении задачи полевой ОБ.

Будет проведено сравнение эффективности использования прямых и итерационных методов для решения уравнения Пуассона, включенного в систему нестационарных уравнений с нелинейной обратной связью на примере быстрого преобразования Фурье и метода стабилизирующей поправки.

В четвертой главе будут представлены и обсуждены результаты компьютерного моделирования поставленных задач, полученных с применением разных численных методов. На основе компьютерных экспериментов будет подтверждена возможность реализации ОБ при определенных условиях. Рассмотрен механизм формирования 2D и 3D волн переключения в полупроводнике и описан алгоритм построения гистерезисной зависимости концентрации свободных электронов от входной интенсивности. Для 2D задачи будет продемонстрировано формирование сложных пространственно-временных структур в случае воздействия на полупроводник внешнего электрического поля - спиральных волн концентрации свободных электронов.

Будут представлены результаты компьютерного моделирования для новой математической модели, учитывающей продольную дифракцию оптического импульса, и продемонстрировано ее принципиальное влияние на процесс распространения оптического импульса в полупроводнике.

Благодарности. Автор выражает благодарность своему научному руководителю к.ф.-м.н. М. М. Логиновой, проф., д.ф.-м.н. В. А. Трофимову за ценные советы, рекомендации и поддержку работы, а также коллективу кафедры вычислительных методов за творческую обстановку.

Глава 1. Постановка некоторых задач распространения оптического импульса в полупроводнике

§1.1. Постановка 2D задачи распространения оптического импульса в полупроводнике

В данном параграфе ставится 2D задача взаимодействия оптического импульса с полупроводником: полупроводник прямоугольной формы находится во внешнем электрическом поле, воздействующем на него вдоль пространственных координат, на одну из граней полупроводника падает оптический импульс (рис. 1.1.1). В параграфе также рассматриваются частные случаи: когда внешнее электрическое поле действует только вдоль одной из координат, или его отсутствия (полупроводник находится в свободном пространстве). Кроме того, предлагается новая математическая модель, учитывающая влияние как поперечной, так и продольной дифракции на процесс распространения оптического импульса в нелинейной среде. Обсуждается инвариант задачи.

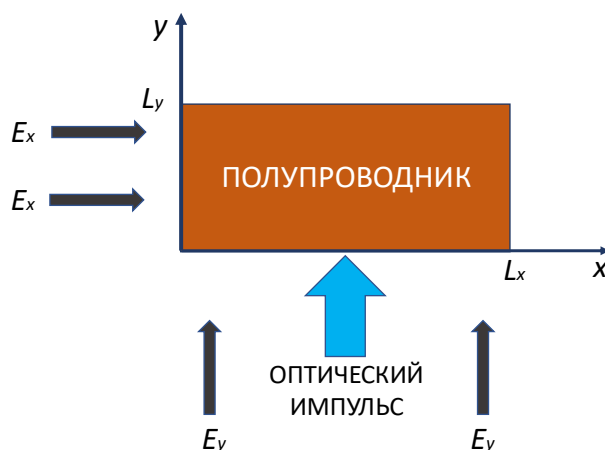


Рис. 1.1.1. Схема взаимодействия оптического импульса с полупроводником в 2D случае. E_x , E_y – компоненты напряженности внешнего электрического поля, x , y – безразмерные пространственные координаты.

1.1.1. Постановка 2D задачи взаимодействия оптического импульса с полупроводником без учета дифракционных эффектов

Процесс взаимодействия оптического импульса с полупроводником в 2D случае описывается следующей системой безразмерных дифференциальных уравнений [6, 20, 57, 103]:

$$\frac{\partial N}{\partial t} = G(n, N, \varphi, I) - R(n, N), \quad 0 \leq x \leq L_x, \quad 0 \leq y \leq L_y, \quad (1.1.1)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial n}{\partial t} = & \kappa_x \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial n}{\partial x} - \mu_x n \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) + \kappa_y \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial n}{\partial y} - \mu_y n \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) + \\ & + G(n, N, \varphi, I) - R(n, N), \quad 0 < x < L_x, \quad 0 < y < L_y, \end{aligned} \quad (1.1.2)$$

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} = \gamma(n - N), \quad 0 < x < L_x, \quad 0 < y < L_y, \quad (1.1.3)$$

$$\frac{\partial I}{\partial y} + \delta_0 \delta(n, N, \varphi) I = 0, \quad 0 \leq x \leq L_x, \quad 0 < y \leq L_y, \quad t > 0. \quad (1.1.4)$$

В системе уравнений (1.1.1) – (1.1.4) введены следующие обозначения: x – поперечная пространственная координата, нормированная на радиус падающего оптического пучка, y – продольная (вдоль которой распространяется импульс) пространственная координата, нормированная на характерную длину полупроводника, L_x – безразмерная толщина поперечного сечения полупроводника, L_y – безразмерная длина полупроводника, t – безразмерное время, измеряемое в единицах времени рекомбинации свободных носителей зарядов. Функции $n(x, y, t)$ и $N(x, y, t)$ – концентрации свободных электронов в зоне проводимости полупроводника и ионизированных доноров, нормированные на максимально возможное в данных условиях значение концентрации доноров. Функция $\varphi(x, y, t)$ – безразмерный потенциал электрического поля, индуцированного оптическим импульсом. Функция $I(x, y, t)$ описывает профиль интенсивности и временную форму оптического импульса, нормированную на ее максимальное значение на входе в нелинейную среду. Параметры μ_x, μ_y – коэффициенты подвижности свободных электронов по поперечной и продольной координате соответственно; κ_x, κ_y – коэффициенты диффузии свободных электронов. Параметр γ зависит, в частности, от максимально возможной концентрации свободных носителей заряда.

Граничные и начальные условия для концентрации свободных электронов n и потенциала лазеро-индуцированного электрического поля φ зависят от присутствия или отсутствия внешнего электрического поля.

Для потенциала лазеро-индуцированного электрического поля φ ставятся граничные условия второго рода (задача Неймана):

$$\left. \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right|_{x=0, L_x} = -E_x, \quad 0 < y < L_y, \quad \left. \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right|_{y=0, L_y} = -E_y, \quad 0 < x < L_x, \quad (1.1.5)$$

где E_x , E_y – компоненты напряженности внешнего электрического поля. Случай неоднородных правых частей (1.1.5) соответствует присутствию внешнего электрического поля, действующего вдоль соответствующей координаты. Если $E_x = E_y = 0$, то полупроводник находится в свободном пространстве.

Для концентрации свободных электронов ставятся однородные граничные условия, соответствующие отсутствию тока через поверхность полупроводника:

$$\left(\frac{\partial n}{\partial x} - \mu_x n \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) \Big|_{x=0, L_x} = 0, \quad 0 < y < L_y, \quad \left(\frac{\partial n}{\partial y} - \mu_y n \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) \Big|_{y=0, L_y} = 0, \quad 0 < x < L_x. \quad (1.1.6)$$

Функция $\delta(n, N, \varphi)$ описывает нелинейный коэффициент поглощения полупроводника, который аппроксимируется близкими к экспериментальным зависимостям функциями [5, 6, 18, 20, 29, 57]:

$$\delta(n, N) = (1 - N)e^{-\psi(1-\xi n)}, \quad \psi, \xi > 0 \text{ – концентрационная зависимость,} \quad (1.1.7)$$

$$\delta(N, \varphi) = (1 - N)e^{-\alpha + \beta|\varphi|}, \quad \alpha, \beta > 0 \text{ – полевая зависимость.} \quad (1.1.8)$$

Параметр δ_0 соответствует максимальному значению нелинейного коэффициента поглощения среды.

Функции генерации G и рекомбинации R , описывающие генерацию электронов с донорного уровня и излучательную рекомбинацию свободных зарядов полупроводника соответственно, определяются следующим образом [6, 57]:

$$G(n, N, \varphi, I) = q_0 I \delta(n, N, \varphi), \quad 0 \leq x \leq L_x, \quad 0 \leq y \leq L_y, \quad t > 0, \\ R(n, N) = \frac{nN - n_0^2}{\tau_R}, \quad 0 \leq x \leq L_x, \quad 0 \leq y \leq L_y, \quad t > 0, \quad (1.1.9)$$

где q_0 – характеризует максимальное значение интенсивности оптического излучения, n_0 – равновесное значение концентраций свободных электронов и ионизированных доноров полупроводника. τ_R – время рекомбинации свободных носителей заряда, которое в следствие выбранной нормировки по времени равно 1. Этот параметр оставлен для общности постановки задачи.

На входе в полупроводник оптический импульс задается в виде Гауссова пучка, быстро достигающего своего максимального значения во времени:

$$I|_{y=0} = e^{-\frac{(x-0.5L_x)^2}{a_x^2}} (1 - e^{-10t}), \quad 0 \leq x \leq L_x, \quad t \geq 0, \quad (1.1.10)$$

где a_x – радиус оптического пучка.

В начальный момент времени излучение отсутствует:

$$I|_{t=0} = 0. \quad (1.1.11)$$

1.1.2. Математическая модель распространения оптического импульса в полупроводнике с учетом продольной дифракции

При работе над разделом использовались материалы из публикации автора [A12].

Как будет показано в главе 4, процесс распространения оптического импульса в полупроводнике при определенных условиях сопровождается формированием в нем контрастных пространственно-временных структур (доменов высокого поглощения). Для того, чтобы математическая модель наиболее точно описывала рассматриваемый процесс, нужно учитывать взаимодействие падающего импульса с границами этих структур. В диссертации предложена и рассмотрена новая математическая модель, в которой прохождение оптического импульса через полупроводник описывается с помощью нелинейного уравнения Шредингера относительно комплексной амплитуды A падающей оптической волны. Таким образом, учитываются дифракционные эффекты. Ранее в работах [83-96] использовался аналогичный подход, однако учитывалась только поперечная дифракция. Новизна модели, предложенной в настоящей работе, состоит в том, что здесь рассматривается также и влияние продольной дифракции, что позволяет моделировать отражение падающего импульса от границы домена высокого поглощения внутри полупроводника (рис. 1.1.2). Эта задача относится к новому

физическому направлению нелинейной градиентной оптике [99-102]. Взаимодействие отраженной и падающей волн приводит к осцилляциям характеристик полупроводника (см. §4.4), которые необходимо учитывать при моделировании ОБ элементов.

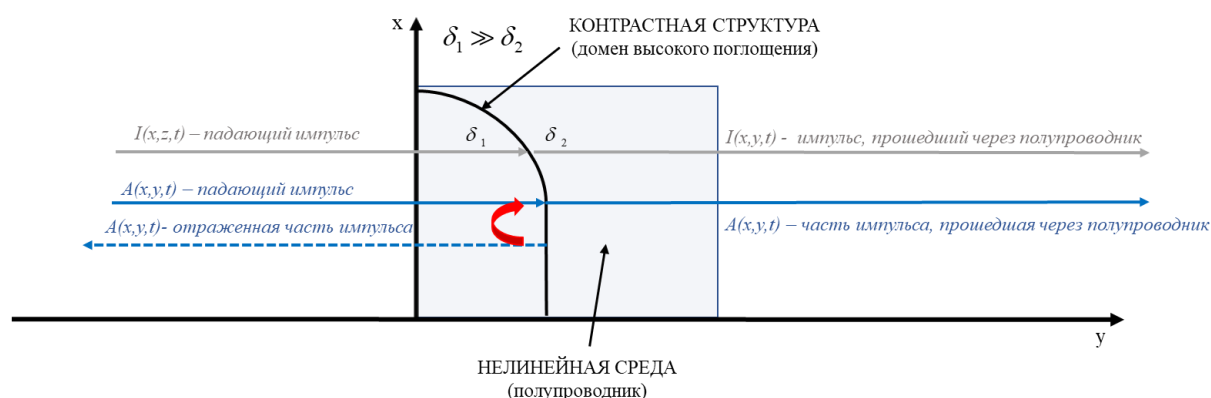


Рис. 1.1.2. Схема взаимодействия оптического импульса с контрастной лазеро-индуцированной структурой без учета дифракционных эффектов (серые линии) и с их учетом (синие линии).

Описываемая математическая модель представляет собой систему, состоящую из уравнений (1.1.1) – (1.1.3) описывающих изменения характеристик полупроводника, и уравнения Шредингера относительно комплексной амплитуды (вместо уравнения (1.1.4) относительно интенсивности I), описывающего эволюцию оптического импульса:

$$\frac{\partial A}{\partial t} + iD_x \frac{\partial^2 A}{\partial x^2} + iD_y \frac{\partial^2 A}{\partial y^2} + \frac{\beta_A \delta_0}{2} \delta(n, N, \varphi) A = 0, \quad 0 < x < L_x, \quad -L_y < y < L_y, \quad t > 0. \quad (1.1.12)$$

В дополнение к обозначениям, введенным в п.1.1.1, используются следующие: A – комплексная амплитуда оптического импульса, медленно изменяющаяся по времени и поперечной координате и быстро изменяющаяся по координате, вдоль которой распространяется оптический импульс; D_x, D_y – коэффициенты дифракции, $D_y = 1/(4\pi\chi)$, $\beta_A = \pi\chi$, где χ – волновое число вдоль оси y . Коэффициент поглощения δ_0 равен нулю вне области полупроводника: $-L_y < y < 0$. Интенсивность оптического излучения связана с комплексной амплитудой следующим соотношением: $I = |A|^2$.

В рассматриваемой модели оптическое излучение представляет собой одиночный импульс, который имеет Гауссово распределение вдоль оси x и гипергауссово вдоль оси y , находящийся в свободном пространстве и движущийся по направлению к полупроводнику, граница которого расположена на прямой $y=0$ (рис. 1.1.3):

$$A|_{t=0} = A_0(x, y) = e^{-\frac{(x-L_{xc})^2}{a_x^2} - \frac{(y-L_{yc})^2}{a_y^2} - 2i\pi\chi(y-L_{yc})}, \quad (1.1.13)$$

где L_{xc} , L_{yc} – начальное положение центра оптического пучка, $L_{yc} < 0$, a_x – радиус оптического пучка вдоль оси x , a_y – радиус оптического пучка вдоль оси y , характеризующий длительность импульса.

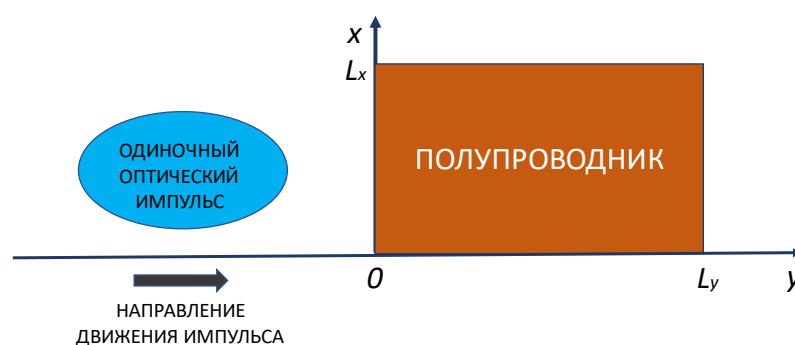


Рис. 1.1.3. Схема взаимодействия дифрагирующего оптического импульса с полупроводником (x , y – безразмерные пространственные координаты).

Из-за финитного распределения профиля падающего оптического пучка и ограниченного временного интервала, для функции A ставятся нулевые граничные условия:

$$A|_{x=0, L_x} = A|_{y=-L_y, L_y} = 0, \quad (1.1.14)$$

Однако, при теоретическом анализе взаимодействия оптического излучения с веществом часто ставятся следующие условия:

$$A|_{x \rightarrow \pm\infty} \rightarrow 0, \quad A|_{y \rightarrow \pm\infty} \rightarrow 0, \quad \frac{\partial^n A}{\partial x^n} \Big|_{x \rightarrow \pm\infty} \rightarrow 0, \quad \frac{\partial^n A}{\partial y^n} \Big|_{y \rightarrow \pm\infty} \rightarrow 0, \quad n = 1, 2, \dots, \quad (1.1.15)$$

предполагая, что функция A и ее n -ая производные убывают, если соответствующая координата стремиться к бесконечности, причем производные функции убывают быстрее чем сама функция.

1.1.3. Задачи нахождения начальных распределений функций

Начальные распределения функций при постановке неоднородных граничных условий (1.1.5) – (1.1.6) соответствуют решению системы стационарных дифференциальных уравнений:

$$nN - n_0^2 = 0, \quad 0 \leq x \leq L_x, \quad 0 \leq y \leq L_y,$$

$$\kappa_x \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial n}{\partial x} - \mu_x n \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) + \kappa_y \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial n}{\partial y} - \mu_y n \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) = 0, \quad 0 < x < L_x, \quad 0 < y < L_y, \quad (1.1.16)$$

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} = \gamma(n - N), \quad 0 < x < L_x, \quad 0 < y < L_y.$$

В случае равенства коэффициентов подвижности $\mu_x = \mu_y = \mu$, к системе (1.1.16) может быть применено следующее преобразование [57, 210]: $n = n_0 e^{\mu\varphi}$.

Тогда задача (1.1.16) сведется к решению одного стационарного 2D нелинейного дифференциального уравнения относительно потенциала электрического поля с граничным условием (1.1.5):

$$\begin{aligned} \mu_x = \mu_y = \mu, \\ \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} = \gamma n_0 (e^{\mu\varphi} - e^{-\mu\varphi}), \quad 0 < x < L_x, \quad 0 < y < L_y. \end{aligned} \quad (1.1.17)$$

Начальные распределения концентраций при этом вычисляются явно через найденный потенциал:

$$n|_{t=0} = n_0 e^{\mu\varphi}, \quad N|_{t=0} = n_0 e^{-\mu\varphi}, \quad 0 \leq x \leq L_x, \quad 0 \leq y \leq L_y. \quad (1.1.18)$$

Если только одна из компонент внешнего электрического поля отлична от нуля, то граничные условия (1.1.5), (1.1.6) принимают вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi}{\partial x} \Big|_{x=0, L_x} = 0, \quad \frac{\partial n}{\partial x} \Big|_{x=0, L_x} = 0, \quad 0 < y < L_y, \\ \frac{\partial \varphi}{\partial y} \Big|_{y=0, L_y} = -E_y, \quad \left(\frac{\partial n}{\partial y} - \mu_y n \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) \Big|_{y=0, L_y} = 0, \quad 0 < x < L_x, \end{aligned} \quad (1.1.19)$$

или

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi}{\partial x} \Big|_{x=0, L_x} = -E_x, \quad \left(\frac{\partial n}{\partial x} - \mu_x n \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) \Big|_{x=0, L_x} = 0, \quad 0 < y < L_y, \\ \frac{\partial \varphi}{\partial y} \Big|_{y=0, L_y} = 0, \quad \frac{\partial n}{\partial y} \Big|_{y=0, L_y} = 0, \quad 0 < x < L_x. \end{aligned} \quad (1.1.20)$$

Для граничных условий (1.1.19) и (1.1.20) начальное распределение характеристик полупроводника однородно по координате, по которой поле отсутствует:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial n}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial N}{\partial x} = 0, \quad 0 < x < L_x, \quad 0 < y < L_y \quad \text{для условия (1.1.19);}$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial y} = 0, \quad \frac{\partial n}{\partial y} = 0, \quad \frac{\partial N}{\partial y} = 0, \quad 0 < x < L_x, \quad 0 < y < L_y \quad \text{для условия (1.1.20).}$$

Исходя из этого, для нахождения начального распределения φ достаточно решить 1D аналог задачи (1.1.17):

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} = \gamma n_0 (e^{\mu_y \varphi} - e^{-\mu_y \varphi}), \quad 0 < y < L_y, \quad \left. \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right|_{y=0, L_y} = -E_y \quad (1.1.21)$$

для условия (1.1.19);

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} = \gamma n_0 (e^{\mu_x \varphi} - e^{-\mu_x \varphi}), \quad 0 < x < L_x, \quad \left. \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right|_{x=0, L_x} = -E_x \quad (1.1.22)$$

для условия (1.1.20).

Значение концентраций в обоих случаях вычисляются по формуле (1.1.18) с использованием соответствующего коэффициента подвижности μ .

Если внешнее поле отсутствует (полупроводник электрически нейтрален), то для уравнений (1.1.2) и (1.1.3) ставятся однородные граничные условия:

$$\left. \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right|_{x=0, L_x} = 0, \quad \left. \frac{\partial n}{\partial x} \right|_{x=0, L_x} = 0, \quad 0 < y < L_y, \quad \left. \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right|_{y=0, L_y} = 0, \quad \left. \frac{\partial n}{\partial y} \right|_{y=0, L_y} = 0, \quad 0 < x < L_x. \quad (1.1.23)$$

Начальные значения функций, описывающих распределение характеристик полупроводника, являются константами:

$$\varphi|_{t=0} = 0, \quad n|_{t=0} = N|_{t=0} = n_0, \quad 0 \leq x \leq L_x, \quad 0 \leq y \leq L_y. \quad (1.1.24)$$

1.1.4. Связь между законом сохранения заряда и разрешимостью задачи Неймана

При взаимодействии оптического излучения с полупроводником имеет место закон сохранения заряда, который записывается в следующем виде:

$$Q(t) = \int_{x=0}^{L_x} \int_{y=0}^{L_y} (n(x, y, t) - N(x, y, t)) dx dy = 0, t \geq 0. \quad (1.1.25)$$

Для получения формулы (1.1.25) достаточно вычесть уравнение (1.1.1) из уравнения (1.1.2) и проинтегрировать результат по всей вычислительной области. Сохранение разностного аналога инварианта (1.1.25) при численном моделировании будет выражать свойство консервативности применяемой конечно-разностной схемы.

Как известно, задача Неймана для уравнения Пуассона (1.1.3), (1.1.5), разрешима, если выполнено следующее условие [202-204]:

$$\gamma \int_G (n(x, y) - N(x, y)) dx dy = \int \frac{\partial \varphi}{\partial v} d\sigma, \quad (1.1.26)$$

где $d\sigma$ – интеграл по поверхности полупроводника, v – одна из пространственных координат.

Очевидно, что, в случае симметричных граничных условий (1.1.5), правая часть уравнения (1.1.26) обращается в нуль. Таким образом условие разрешимости задачи Неймана (1.1.26) совпадает с законом сохранения заряда (1.1.25). Следовательно, при построении разностной схемы для решения задачи (1.1.1) – (1.1.6), ее консервативность будет играть ключевую роль для разрешимости задачи Неймана для уравнения Пуассона.

§1.2. Постановка 3D задачи распространения оптического импульса в полупроводнике

Теперь рассмотрим 3D задачу взаимодействия оптический импульса с полупроводником. В отличие от 2D случая, здесь полупроводник представляет собой прямоугольный параллелепипед, который по-прежнему находится во внешнем электрическом поле, воздействующем на него вдоль пространственных координат. Оптический импульс, распространяющийся вдоль оси z , падает на грань, соответствующую плоскости $z=0$. Схема взаимодействия представлена на рис. 1.2.1.

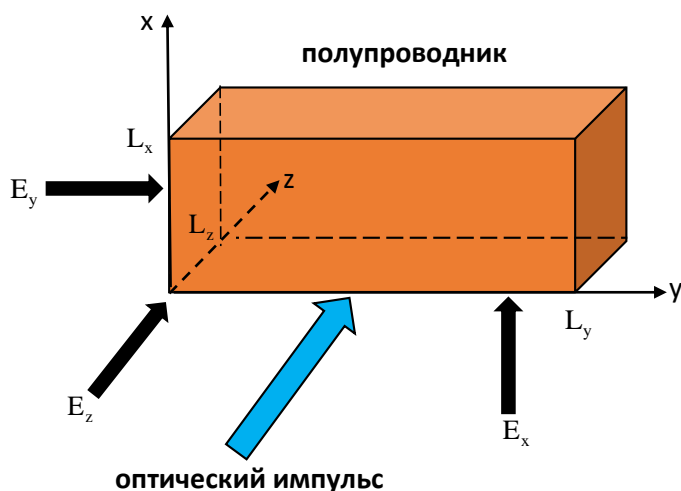


Рис. 1.2.1. Схема взаимодействия оптического импульса с полупроводником. E_x , E_y , E_z – компоненты напряженности внешнего электрического поля.

1.2.1. Постановка 3D задачи взаимодействия оптического импульса с полупроводником без учета дифракционных эффектов

Процесс взаимодействия оптического импульса с полупроводником в 3D случае описывается следующей системой безразмерных дифференциальных уравнений:

$$\frac{\partial N}{\partial t} = G(n, N, \varphi, I) - R(n, N), \quad 0 \leq x \leq L_x, \quad 0 \leq y \leq L_y, \quad 0 \leq z \leq L_z, \quad t > 0, \quad (1.2.1)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial n}{\partial t} = & \kappa_x \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial n}{\partial x} - \mu_x n \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) + \kappa_y \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial n}{\partial y} - \mu_y n \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) + \kappa_z \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial n}{\partial z} - \mu_z n \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right) + \\ & + G(n, N, \varphi, I) - R(n, N), \quad 0 < x < L_x, \quad 0 < y < L_y, \quad 0 < z < L_z, \quad t > 0, \end{aligned} \quad (1.2.2)$$

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} = \gamma(n - N), \quad 0 < x < L_x, \quad 0 < y < L_y, \quad 0 < z < L_z, \quad t > 0, \quad (1.2.3)$$

$$\frac{\partial I}{\partial z} + \delta_0 \delta(n, N, \varphi) I = 0, \quad 0 \leq x \leq L_x, \quad 0 \leq y \leq L_y, \quad 0 < z \leq L_z, \quad t > 0. \quad (1.2.4)$$

В (1.2.1) – (1.2.4) используются те же обозначения, что и для 2D задачи (1.1.1) – (1.1.4) с поправкой на присутствие дополнительной пространственной координаты z .

Для потенциала лазеро-индуцированного электрического поля φ ставятся граничные условия второго рода (задача Неймана):

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right|_{x=0, L_x} &= -E_x, \quad 0 < y < L_y, \quad 0 < z < L_z, \\ \left. \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right|_{y=0, L_y} &= -E_y, \quad 0 < x < L_x, \quad 0 < z < L_z, \\ \left. \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right|_{z=0, L_z} &= -E_z, \quad 0 < x < L_x, \quad 0 < y < L_y. \end{aligned} \quad (1.2.5)$$

Для концентрации свободных электронов ставятся однородные граничные условия, соответствующие отсутствию тока через поверхность полупроводника:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial n}{\partial x} - \mu_x n \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) \Big|_{x=0, L_x} &= 0, \quad 0 < y < L_y, \quad 0 < z < L_z, \\ \left(\frac{\partial n}{\partial y} - \mu_y n \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) \Big|_{y=0, L_y} &= 0, \quad 0 < x < L_x, \quad 0 < z < L_z, \\ \left(\frac{\partial n}{\partial z} - \mu_z n \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right) \Big|_{z=0, L_z} &= 0, \quad 0 < x < L_x, \quad 0 < y < L_y. \end{aligned} \quad (1.2.6)$$

Граничное условие для интенсивности задается в сечении $z=0$:

$$I \Big|_{z=0} = e \frac{(x-0.5L_x)^2}{a_x^2} e \frac{(y-0.5L_y)^2}{a_y^2} (1 - e^{-10t}), \quad 0 \leq x \leq L_x, \quad 0 \leq y \leq L_y, \quad t \geq 0. \quad (1.2.7)$$

где a_x , a_y – радиусы оптического пучка.

Закон сохранения заряда (1.1.25) для 3D случая принимает следующий вид:

$$Q(t) = \int_{x=0}^{L_x} \int_{y=0}^{L_y} \int_{z=0}^{L_z} (n(x, y, z, t) - N(x, y, z, t)) dx dy dz = 0, \quad t \geq 0. \quad (1.2.8)$$

1.2.2. Задача распространения оптического импульса в полупроводнике с учетом продольной дифракции в 3D случае

Математическая модель (1.1.1) – (1.1.3), (1.1.12) в 3D случае записывается как система, состоящая из уравнений (1.2.1) – (1.2.3), описывающих изменения характеристик

полупроводника, и уравнения Шредингера относительно комплексной амплитуды (вместо уравнения (1.2.4)):

$$\frac{\partial A}{\partial t} + iD_x \frac{\partial^2 A}{\partial x^2} + iD_y \frac{\partial^2 A}{\partial y^2} + iD_z \frac{\partial^2 A}{\partial z^2} + \frac{\beta_A \delta_0}{2} \delta(n, N, \varphi) A = 0, \quad (1.2.9)$$

$$0 < x < L_x, \quad 0 < y < L_y, \quad -L_z < z < L_z, \quad t > 0.$$

В уравнении (1.2.9) $D_z = 1/(4\pi\chi)$.

В начальный момент времени импульс расположен за пределами полупроводника и распространяется вдоль оси z , по направлению к границе полупроводника, расположенной в плоскости $z=0$:

$$A|_{t=0} = A_0(x, y, z) = e^{-\frac{(x-L_{xc})^2}{a_x^2} - \frac{(y-L_{yc})^2}{a_y^2} - \frac{(z-L_{zc})^{10}}{a_z^{10}} - 2i\pi\chi(z-L_{zc})}. \quad (1.2.10)$$

Для функции A ставятся нулевые граничные условия:

$$A|_{x=0, L_x} = A|_{y=0, L_y} = A|_{z=-L_z, L_z} = 0. \quad (1.2.11)$$

1.2.3. Задачи нахождения начальных распределений функций

Начальные распределения функций при постановке неоднородных граничных условий (1.2.5) – (1.2.6) будут соответствовать решению системы стационарных дифференциальных уравнений:

$$\begin{aligned} nN - n_0^2 &= 0, \quad 0 \leq x \leq L_x, \quad 0 \leq y \leq L_y, \quad 0 \leq z \leq L_z, \\ \kappa_x \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial n}{\partial x} - \mu_x n \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) + \kappa_y \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial n}{\partial y} - \mu_y n \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) + \\ + \kappa_z \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial n}{\partial z} - \mu_z n \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right) &= 0, \quad 0 < x < L_x, \quad 0 < y < L_y, \quad 0 < z < L_z, \\ \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} &= \gamma(n - N), \quad 0 < x < L_x, \quad 0 < y < L_y, \quad 0 < z < L_z \end{aligned} \quad (1.2.12)$$

В случае равенства коэффициентов подвижности $\mu_x = \mu_y = \mu_z = \mu$ к системе (1.2.12) может быть применено преобразование, аналогичное (1.1.17):

$$\mu_x = \mu_y = \mu_z = \mu$$

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} = \gamma n_0 (e^{\mu\varphi} - e^{-\mu\varphi}), \quad 0 < x < L_x, \quad 0 < y < L_y, \quad 0 < z < L_z. \quad (1.2.13)$$

Начальные распределения концентраций при этом вычисляются явно через найденный потенциал:

$$n|_{t=0} = n_0 e^{\mu\varphi}, \quad N|_{t=0} = n_0 e^{-\mu\varphi}, \quad 0 \leq x \leq L_x, \quad 0 \leq y \leq L_y, \quad 0 \leq z \leq L_z. \quad (1.2.14)$$

Если электрическое поле направлено по двум координатам, граничные условия записываются в зависимости от направления, по которому поле не действует.

Поле отсутствует вдоль оси z :

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right|_{x=0, L_x} &= -E_x, \quad \left(\frac{\partial n}{\partial x} - \mu_x n \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) \Big|_{x=0, L_x} = 0, \quad 0 < y < L_y, \quad 0 < z < L_z, \\ \left. \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right|_{y=0, L_y} &= -E_y, \quad \left(\frac{\partial n}{\partial y} - \mu_y n \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) \Big|_{y=0, L_y} = 0, \quad 0 < x < L_x, \quad 0 < z < L_z, \\ \left. \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right|_{z=0, L_z} &= 0, \quad \left. \frac{\partial n}{\partial z} \right|_{z=0, L_z} = 0, \quad 0 < x < L_x, \quad 0 < y < L_y. \end{aligned} \quad (1.2.15)$$

Поле отсутствует вдоль оси y :

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right|_{x=0, L_x} &= -E_x, \quad \left(\frac{\partial n}{\partial x} - \mu_x n \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) \Big|_{x=0, L_x} = 0, \quad 0 < y < L_y, \quad 0 < z < L_z, \\ \left. \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right|_{y=0, L_y} &= 0, \quad \left. \frac{\partial n}{\partial y} \right|_{y=0, L_y} = 0, \quad 0 < x < L_x, \quad 0 < z < L_z, \\ \left. \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right|_{z=0, L_z} &= -E_z, \quad \left(\frac{\partial n}{\partial z} - \mu_z n \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right) \Big|_{z=0, L_z} = 0, \quad 0 < x < L_x, \quad 0 < y < L_y. \end{aligned} \quad (1.2.16)$$

Поле отсутствует вдоль оси x :

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right|_{x=0, L_x} &= 0, \quad \left. \frac{\partial n}{\partial x} \right|_{x=0, L_x} = 0, \quad 0 < y < L_y, \quad 0 < z < L_z, \\ \left. \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right|_{y=0, L_y} &= -E_y, \quad \left(\frac{\partial n}{\partial y} - \mu_y n \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) \Big|_{y=0, L_y} = 0, \quad 0 < x < L_x, \quad 0 < z < L_z, \\ \left. \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right|_{z=0, L_z} &= -E_z, \quad \left(\frac{\partial n}{\partial z} - \mu_z n \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right) \Big|_{z=0, L_z} = 0, \quad 0 < x < L_x, \quad 0 < y < L_y. \end{aligned} \quad (1.2.17)$$

Для граничных условий (1.2.15) – (1.2.17) начальное распределение характеристик полупроводника однородно по координате, по которой поле отсутствует:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial z} = 0, \quad \frac{\partial n}{\partial z} = 0, \quad \frac{\partial N}{\partial z} = 0, \quad 0 < x < L_x, \quad 0 < y < L_y, \quad 0 < z < L_z \text{ для условия (1.2.15);}$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial y} = 0, \quad \frac{\partial n}{\partial y} = 0, \quad \frac{\partial N}{\partial y} = 0, \quad 0 < x < L_x, \quad 0 < y < L_y, \quad 0 < z < L_z \text{ для условия (1.2.16);}$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial n}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial N}{\partial x} = 0, \quad 0 < x < L_x, \quad 0 < y < L_y, \quad 0 < z < L_z \text{ для условия (1.2.17).}$$

Исходя из этого, для нахождения начального распределения характеристик полупроводника достаточно решить 2D задачу (1.1.16) на соответствующих осях. При этом преобразование (1.1.17) так же имеет место.

Если электрическое поле направлено по одной из осей координат, граничные условия записываются в зависимости от направления поля.

Вдоль оси x :

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right|_{x=0, L_x} &= -E_x, \quad \left(\frac{\partial n}{\partial x} - \mu_x n \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) \Big|_{x=0, L_x} = 0, \quad 0 < y < L_y, \quad 0 < z < L_z, \\ \left. \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right|_{y=0, L_y} &= 0, \quad \left. \frac{\partial n}{\partial y} \right|_{y=0, L_y} = 0, \quad 0 < x < L_x, \quad 0 < z < L_z, \\ \left. \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right|_{z=0, L_z} &= 0, \quad \left. \frac{\partial n}{\partial z} \right|_{z=0, L_z} = 0, \quad 0 < x < L_x, \quad 0 < y < L_y. \end{aligned} \quad (1.2.18)$$

Вдоль оси y :

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right|_{x=0, L_x} &= 0, \quad \left. \frac{\partial n}{\partial x} \right|_{x=0, L_x} = 0, \quad 0 < y < L_y, \quad 0 < z < L_z, \\ \left. \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right|_{y=0, L_y} &= -E_y, \quad \left(\frac{\partial n}{\partial y} - \mu_y n \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) \Big|_{y=0, L_y} = 0, \quad 0 < x < L_x, \quad 0 < z < L_z, \\ \left. \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right|_{z=0, L_z} &= 0, \quad \left. \frac{\partial n}{\partial z} \right|_{z=0, L_z} = 0, \quad 0 < x < L_x, \quad 0 < y < L_y. \end{aligned} \quad (1.2.19)$$

Вдоль оси z :

$$\begin{aligned}
\left. \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right|_{x=0, L_x} &= 0, \quad \left. \frac{\partial n}{\partial x} \right|_{x=0, L_x} = 0, \quad 0 < y < L_y, \quad 0 < z < L_z, \\
\left. \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right|_{y=0, L_y} &= 0, \quad \left. \frac{\partial n}{\partial y} \right|_{y=0, L_y} = 0, \quad 0 < x < L_x, \quad 0 < z < L_z, \\
\left. \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right|_{z=0, L_z} &= -E_z, \quad \left(\frac{\partial n}{\partial z} - \mu_z n \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right) \Big|_{z=0, L_z} = 0, \quad 0 < x < L_x, \quad 0 < y < L_y.
\end{aligned} \tag{1.2.20}$$

С учетом равенства нулю соответствующих производных, начальное распределение φ находится решением 1D варианта уравнения (1.2.13). К примеру, (1.1.22) для условия (1.2.18). Значение концентраций во всех случаях вычисляются по формуле (1.2.14) с использованием соответствующего коэффициента подвижности μ .

Если внешнее поле отсутствует (полупроводник электрически нейтрален), то для уравнений (1.2.2) и (1.2.3) ставятся однородные граничные условия:

$$\begin{aligned}
\left. \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right|_{x=0, L_x} &= 0, \quad \left. \frac{\partial n}{\partial x} \right|_{x=0, L_x} = 0, \quad 0 < y < L_y, \quad 0 < z < L_z, \\
\left. \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right|_{y=0, L_y} &= 0, \quad \left. \frac{\partial n}{\partial y} \right|_{y=0, L_y} = 0, \quad 0 < x < L_x, \quad 0 < z < L_z, \\
\left. \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right|_{z=0, L_z} &= 0, \quad \left. \frac{\partial n}{\partial z} \right|_{z=0, L_z} = 0, \quad 0 < x < L_x, \quad 0 < y < L_y.
\end{aligned} \tag{1.2.21}$$

Начальные значения функций, описывающих распределение характеристик полупроводника, являются константами:

$$\varphi|_{r=0} = 0, \quad n|_{r=0} = N|_{r=0} = n_0, \quad 0 \leq x \leq L_x, \quad 0 \leq y \leq L_y, \quad 0 \leq z \leq L_z. \tag{1.2.22}$$

§1.3. Множественность решений рассматриваемых задач при постановке граничных условий Неймана для потенциала электрического поля. Условия выделения единственного решения

При постановке граничных условий Неймана решение уравнения Пуассона определяется с точностью до константы, которая не несет физического смысла. Однако, при некоторых постановках задачи генерация свободных электронов, которая зависит от коэффициента поглощения чувствительна к изменению потенциала. Это может привести к изменению

распределения концентрации свободных электронов, не обусловленному физической природой процесса. Поэтому, выделение единственного решения для уравнения Пуассона является ключевой проблемой при математическом моделировании задачи ОБ. Для этого необходимо использовать дополнительные критерии, построению которых посвящен данный параграф.

Рассмотрение проведено на примере 2D постановки задачи. При работе над параграфом использовались материалы из публикации автора [A10].

1.3.1. Полевая модель оптической бистабильности

Если коэффициент поглощения полупроводника зависит от потенциала электрического поля (1.1.8), то функция φ явно входит в уравнения (1.1.1), (1.1.2) и (1.1.4) задачи (1.1.1) – (1.1.6). В этом случае ее изменение на константу приводит к изменению значений функций n , N , I . При этом измененные значения этих функций так же будут решением задачи (1.1.1) – (1.1.6). Таким образом решение задачи не единственно. Для обеспечения единственности решения задачи к нему необходимо применять нормировку. В работе для этого предложено два подхода.

Представим потенциал $\varphi(x, y, t)$ в виде: $\varphi(x, y, t) = \bar{\varphi}(x, y, t) - C_\varphi(t)$, где $\bar{\varphi}(x, y, t)$ является полученным решением задачи (1.1.1) – (1.1.6), $C_\varphi(t)$ – параметр нормировки, зависящий от времени. Первый подход заключается в том, чтобы в каждый момент времени в некоторой точке области зафиксировать значение потенциала $\varphi(x_1, y_1, t)$ в виде константы. К примеру, можно потребовать постоянного значения потенциала в угловой точке рассматриваемой области. Математически данное условие можно записать как $\varphi(0, 0, t) = \varphi(0, 0, 0)$. В этом случае параметр $C_\varphi(t)$ будет определяться формулой:

$$C_\varphi(t) = \bar{\varphi}(0, 0, t) - \varphi(0, 0, 0), \quad 0 < t \leq L_t. \quad (1.3.1)$$

Другой подход заключается в требовании сохранения интеграла от потенциала электрического поля, взятого по рассматриваемому пространственному домену:

$$C_\varphi(t) = \frac{1}{L_x L_y} \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} \bar{\varphi} dx dy, \quad 0 < t \leq L_t. \quad (1.3.2)$$

Данный интеграл характеризует среднее значение потенциала лазеро-индуцированного электрического поля полупроводника. При этом полагается, что потенциал внутри

полупроводника, находящегося в свободном пространстве, в начальный момент времени равен нулю.

Очевидно, что при использовании разных нормировок потенциала могут быть получены различные решения (примеры будут представлены в §3.2).

1.3.2. Концентрационная модель оптической бистабильности

Если коэффициент поглощения полупроводника зависит от концентрации свободных электронов (1.1.7), то изменение значения потенциала электрического поля φ на константу не оказывает влияния на решение системы (1.1.1) – (1.1.6): значения функций n , N , I останутся неизменными, т. к. уравнения относительно этих функций содержат только производную потенциала. Однако, при использовании итерационного метода для решения уравнения Пуассона целесообразно выделять единственное решение для потенциала φ , воспользовавшись одним из критериев (1.3.1) или (1.3.2), т. к. это упрощает дальнейший анализ полученных результатов.

1.3.3. Выбор условия выделения единственного решения для задачи нахождения начального распределения характеристик полупроводника

Рассмотрим задачу (1.1.16) для нахождения начального распределения функций в случае неоднородных граничных условий (1.1.5) – (1.1.6). Нетрудно заметить, что потенциал электрического поля φ может быть найден только с точностью до константы. Однако если коэффициент поглощения нелинейно зависит от потенциала электрического поля (1.1.8), то сдвиг решения на константу, в том числе и начального распределения, может существенно повлиять на решение задачи (1.1.1) – (1.1.6).

Воспользуемся методом установления для задачи (1.1.16). Есть множество возможных записей данного метода для данной системы дифференциальных уравнений. Для примера рассмотрим следующий:

$$nN - n_0^2 = 0, \quad 0 \leq x \leq L_x, \quad 0 \leq y \leq L_y,$$

$$\frac{\partial n}{\partial t_0} = \kappa_x \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial n}{\partial x} - \mu_x n \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) + \kappa_y \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial n}{\partial y} - \mu_y n \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right), \quad (1.3.3)$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t_0} = \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} - \gamma(n - N), \quad 0 < x < L_x, \quad 0 < y < L_y, \quad t_0 > 0,$$

где t_0 – параметр установления (искусственное время). С учетом вышесказанного, при записи граничных условий предполагаем, что внешнее поле плавно изменяется до достижения постоянного значения:

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial \varphi(t_0)}{\partial x} \right|_{x=0, L_x} &= -\tilde{E}_x(t_0) = -E_x(1 - e^{-t_0/\tau_\varphi}), \quad \left. \left(\frac{\partial n}{\partial x} + \mu_x n \tilde{E}_x(t_0) \right) \right|_{x=0, L_x} = 0, \quad 0 < y < L_y, \quad t_0 > 0, \\ \left. \frac{\partial \varphi(t_0)}{\partial y} \right|_{y=0, L_y} &= -\tilde{E}_y(t_0) = -E_y(1 - e^{-t_0/\tau_\varphi}), \quad \left. \left(\frac{\partial n}{\partial y} + \mu_y n \tilde{E}_y(t_0) \right) \right|_{y=0, L_y} = 0, \quad 0 < x < L_x, \quad t_0 > 0, \end{aligned} \quad (1.3.4)$$

где τ_φ – константа, характеризующая скорость изменения напряженности электрического поля.

Как говорилось в п 1.1.4, закон сохранения (1.1.25) играет важную роль при решении задачи (1.1.1) – (1.1.6). Проверим его выполнение и для задачи нахождения начальных условий (1.3.3) – (1.3.4):

$$\begin{aligned} \frac{\partial Q(t_0)}{\partial t_0} &= \int_{x=0}^{L_x} \int_{y=0}^{L_y} \left(\frac{\partial n}{\partial t_0} - \frac{\partial N}{\partial t_0} \right) dx dy = \kappa_x \int_{x=0}^{L_x} \int_{y=0}^{L_y} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial n}{\partial x} - \mu_x n \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) dx dy + \\ &+ \kappa_y \int_{x=0}^{L_x} \int_{y=0}^{L_y} \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial n}{\partial y} - \mu_y n \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) dx dy - \int_{x=0}^{L_x} \int_{y=0}^{L_y} \frac{\partial}{\partial t_0} \left(\frac{n_0^2}{n} \right) dx dy = \int_{x=0}^{L_x} \int_{y=0}^{L_y} \frac{n_0^2}{n^2} \frac{\partial n}{\partial t_0} dx dy \neq 0. \end{aligned} \quad (1.3.5)$$

Как видно из (1.3.5), задача (1.3.3) – (1.3.4) удовлетворяет закону сохранения заряда только при достижении стационарного состояния. Причиной этого является уравнение относительно концентрации ионизированных доноров $nN - n_0^2 = 0$. Заменим его на аналог уравнения (1.1.1):

$$\frac{\partial N}{\partial t_0} = -\frac{nN - n_0^2}{\tau_N}, \quad (1.3.6)$$

где τ_N – некий регуляризатор.

Таким образом инвариант (1.3.5) примет следующий вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial Q(t_0)}{\partial t_0} &= \int_{x=0}^{L_x} \int_{y=0}^{L_y} \left(\frac{\partial n}{\partial t_0} - \frac{\partial N}{\partial t_0} \right) dx dy = \kappa_x \int_{x=0}^{L_x} \int_{y=0}^{L_y} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial n}{\partial x} - \mu_x n \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) dx dy + \\ &+ \kappa_y \int_{x=0}^{L_x} \int_{y=0}^{L_y} \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial n}{\partial y} - \mu_y n \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) dx dy + \int_{x=0}^{L_x} \int_{y=0}^{L_y} \frac{nN - n_0^2}{\tau_N} dx dy = \int_{x=0}^{L_x} \int_{y=0}^{L_y} \frac{nN - n_0^2}{\tau_N} dx dy. \end{aligned} \quad (1.3.7)$$

Следовательно, закон сохранения заряда (1.1.25) по-прежнему не соблюдается. Однако если добавить слагаемое-регулизатор $\frac{nN - n_0^2}{\tau_N}$ в правую часть уравнения относительно концентрации свободных электронов, то система (1.3.3) примет следующий вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial N}{\partial t_0} &= -\frac{nN - n_0^2}{\tau_N}, \quad 0 \leq x \leq L_x, \quad 0 \leq y \leq L_y, \quad t_0 > 0, \\ \frac{\partial n}{\partial t_0} &= \kappa_x \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial n}{\partial x} - \mu_x n \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) + \kappa_y \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial n}{\partial y} - \mu_y n \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) - \frac{nN - n_0^2}{\tau_N}, \\ \frac{\partial \varphi}{\partial t_0} &= \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} - \gamma(n - N), \quad 0 < x < L_x, \quad 0 < y < L_y, \quad t_0 > 0. \end{aligned} \quad (1.3.8)$$

Нетрудно видеть, что для системы уравнений (1.3.8) с граничными условиями (1.3.4) закон сохранения заряда (1.1.25) выполняется в любой момент времени t_0 .

Для уравнений относительно концентраций это справедливо в силу (1.3.7). Для уравнения относительно потенциала электрического поля φ имеем:

$$\gamma Q(t_0) = \int_{x=0}^{L_x} \int_{y=0}^{L_y} \gamma(n - N) dx dy = \int_{x=0}^{L_x} \int_{y=0}^{L_y} \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} \right) dx dy - \int_{x=0}^{L_x} \int_{y=0}^{L_y} \frac{\partial \varphi}{\partial t_0} dx dy. \quad (1.3.9)$$

В силу симметричности граничных условий (1.3.4) первый интеграл в правой части (1.3.9) обращаются в нуль. Следовательно, интеграл (1.3.9) равен нулю либо при достижении стационарного распределения потенциала электрического поля, либо при равенстве нулю второго интеграла. Если считать, что начальное распределения потенциала $\varphi|_{t_0=0} = 0$, то данное условие записывается в следующем виде:

$$\int_{x=0}^{L_x} \int_{y=0}^{L_y} \varphi dx dy = 0, \quad t_0 > 0. \quad (1.3.10)$$

Заметим, что система (1.3.8) с граничными условиями (1.3.4) решается с точностью до константы относительно φ . Таким образом решение данной задачи удовлетворяло условию (1.3.10), если для него используется нормировка (1.3.2):

$$\int_0^{L_x} \int_0^{L_y} \varphi dx dy = \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} \bar{\varphi} dx dy - \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} C_\varphi(t) dx dy \Rightarrow L_x L_y C_\varphi(t) = \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} \bar{\varphi} dx dy.$$

Заметим, что для трехмерной задачи (1.2.12) соответствующая перенормировка решения записывается в виде:

$$\varphi = \bar{\varphi} - \frac{1}{L_x L_y L_z} \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} \int_0^{L_z} \bar{\varphi} dx dy dz. \quad (1.3.11)$$

Полученная выше система (1.3.8), (1.3.4) в силу своей консервативности в дальнейшем будет использована для построения численного метода решения задачи нахождения начального распределения (1.1.16).

§1.4. Некоторые аналитические оценки решения 2D задач воздействия оптического импульса на полупроводник

Ниже приведены некоторые оценки для решения задачи (1.1.1) – (1.1.3) с уравнением Шредингера (1.1.12) и коэффициентом поглощения, зависящим от концентрации электронов (1.1.7) при отсутствии внешнего электрического поля (1.1.23).

При работе над параграфом использовались материалы из публикаций автора [A7, A12].

1.4.1 Положительность и ограниченность концентрации ионизированных доноров

Докажем, что концентрация ионизированных доноров не превосходит единицы: $N \leq 1$. Производные функции генерации (1.1.9) по функциям n , N имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial G}{\partial n} &= \xi \psi G \geq 0, \text{ если } G \geq 0, \\ \frac{\partial G}{\partial N} &= -e^{-\psi(1-\xi n)} |A|^2 \leq 0. \end{aligned} \quad (1.4.1)$$

Следовательно, генерация G находится в прямой зависимости от концентрации свободных электронов и обратной зависимости от концентрации ионизированных доноров.

Аналогичные производные от функции рекомбинации R имеют вид:

$$\frac{\partial R}{\partial n} = \frac{N}{\tau_R}, \quad \frac{\partial R}{\partial N} = \frac{n}{\tau_R} \quad (1.4.2)$$

и находятся в прямой зависимости от концентраций n и N .

Поскольку начальная интенсивность оптического импульса равна нулю, а концентрации равны их равновесным значениям (1.1.24), то в начальный момент времени функции G и R так же равны нулю. При попадании оптического импульса в полупроводник возникает генерация заряженных частиц, и их концентрации увеличиваются. Предположим, что в определенный момент времени разность $G - R$ имеет отрицательное значение. Это значит, что правая часть уравнения (1.1.1) становится отрицательной. Следовательно, существует такое значение N^* (и оно меньше единицы), при котором правая часть этого уравнения была равна нулю. Это означает, что дальнейший рост функции N останавливается. Таким образом, N не может превосходить единицу.

1.4.2 Ограниченность концентрации свободных электронов в норме L_1

Помимо закона сохранения заряда (1.1.25) имеет место еще одно интегральное соотношение для концентраций заряженных частиц:

$$\bar{Q}(t) = \int_0^{L_y} \int_0^{L_x} (n(x, y, t) + (1 - N(x, y, t))) dx dy = \int_0^{L_y} \int_0^{L_x} (n_0 + (1 - n_0)) dx dy = L_x L_y. \quad (1.4.3)$$

Если определить норму в L_1 для неотрицательных функций как

$$\|f\|_{L_1} = \int_0^{L_y} \int_0^{L_x} f(x, y) dx dy, \quad (1.4.4)$$

и предположить неотрицательность функций $n(x, y, t)$, $1 - N(x, y, t)$ (для $1 - N$ это следует из ограниченности N), тогда (1.4.3) записывается в следующем виде:

$$\|n\|_{L_1} + \|1 - N\|_{L_1} = \|n_0\|_{L_1} + \|1 - n_0\|_{L_1} = L_x L_y. \quad (1.4.5)$$

С учетом начальных условий (1.1.24) инвариант (1.1.25) записывается как:

$$\|n\|_{L_1} = \|N\|_{L_1}. \quad (1.4.6)$$

Следовательно, из ограниченности нормы одной из функций n , N следует ограниченность и второй. В силу ограниченности функции N ($N \leq 1$), норма $\|N\|_{L_1} \leq L_x L_y$. Таким образом норма $\|n\|_{L_1}$ так же будет ограничена.

1.4.3 Существование решения уравнения относительно концентрации свободных электронов

Наиболее сложную проблему представляет собой доказательство существования и единственности решения нелинейного уравнения относительно концентрации свободных электронов. Строго доказательства в диссертации нет, но ниже обсуждается возможный путь такого исследования на основе хорошо известных в литературе подходов.

Заметим, что уравнение (1.1.2) имеет структуру, схожую с уравнениями гидродинамики, в которых учитываются термодиффузионные потоки. Так, в [211] продемонстрировано существование и единственность решения системы уравнений, дифференциальный оператор которой аналогичен оператору уравнения для концентрации свободных электронов. Похожие операторы, схожие с уравнением Фоккера-Планка [212], также используются для описания динамики газовых смесей.

Другой возможный подход - доказательство существования и единственности решения задачи (1.1.1) – (1.1.3), (1.1.12) на маленьком временном интервале $t \in [0, t_\varepsilon]$. Для этого нужно использовать многоэтапный итерационный процесс, аналогичный предложенному ниже в данной работе. Для этого уравнение (1.1.2) записывается в виде:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \kappa_x \frac{\partial}{\partial x} \left(e^{\mu_x \varphi} \frac{\partial}{\partial x} (n e^{-\mu_x \varphi}) \right) + \kappa_y \frac{\partial}{\partial y} \left(e^{\mu_y \varphi} \frac{\partial}{\partial y} (n e^{-\mu_y \varphi}) \right) + G - R. \quad (1.4.7)$$

В уравнении (1.4.7) присутствует нелинейная зависимость коэффициентов диффузии от потенциала электрического поля. Эти коэффициенты положительны. В литературе уравнение теплопроводности с нелинейной зависимостью диффузии тепла были исследованы в [213-214], но для 1D случая. В случае постановки 2D задачи возможно использование итерационного процесса.

Заметим, что есть два частных случая, для которых легко применить результаты из [213]. Первый случай соответствует равенству коэффициентов подвижности электронов: $\mu_x = \mu_y$. В этом случае уравнение (1.4.7) преобразуется к виду уравнения теплопроводности с нелинейной зависимостью коэффициентов диффузии и теплоемкостью. Вторым случаем соответствует равенству произведений коэффициентов диффузии и коэффициентов подвижности электронов по каждой из координат: $K_x \mu_x = K_y \mu_y$. В этом случае уравнение (1.4.7) принимает вид уравнения Фоккера-Планка.

Заметим, что при использовании итерационного процесса для доказательства существования и единственности решения уравнения относительно концентрации n (или всей системы (1.1.1) – (1.1.3), (1.1.12)), то на каждой итерации рассматриваются линейные уравнения, для которых доказано существование решения [213]

Таким образом, можно утверждать, что решение задачи (1.1.1) – (1.1.3), (1.1.12) существует и единственно. Для доказательства этого можно применить теоремы из [211, 213-214] и итерационный процесс.

При построении разностных схем предполагается, что функции G и R обладают свойством непрерывности по Липшицу.

1.4.4 Некоторые оценки для потенциала электрического поля

Представим некоторые оценки для потенциала электрического поля, который является решением уравнения Пуассона (1.1.3). Так как это линейное уравнение, записанное в прямоугольной области, существование его решения широко исследовано в литературе (см. например [106, 115, 149, 213, 215]).

Предположим, что функции в правой части уравнения известны. Умножим уравнение Пуассона на функцию φ и затем возьмем интеграл по области, занимаемой полупроводником:

$$\int_0^{L_y} \int_0^{L_x} (\varphi \Delta \varphi) dx dy = -\gamma \int_0^{L_y} \int_0^{L_x} ((N - n)\varphi) dx dy \quad (1.4.8)$$

Или, с учетом граничных условий (1.1.24):

$$\int_0^{L_y} \int_0^{L_x} (\nabla \varphi)^2 dx dy = \gamma \int_0^{L_y} \int_0^{L_x} ((N-n)\varphi) dx dy, \quad \nabla \varphi = \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \varphi}{\partial y} \right)^2. \quad (1.4.9)$$

Следовательно, используя равенство Коши-Буняковского и ε -равенство, записывается оценка:

$$\|\nabla \varphi\|_{L_2}^2 \leq \gamma |(N-n, \varphi)| \leq \gamma \left(\varepsilon \|n-N\|_{L_2}^2 + \frac{1}{4\varepsilon} \|\varphi\|_{L_2}^2 \right), \quad \varepsilon > 0, \quad (1.4.10)$$

где норма в L_2 для потенциала электрического поля и концентраций заряженных частиц определяется в области полупроводника следующим образом:

$$\|\varphi\|_{L_2}^2 = (\varphi, \varphi) = \int_0^{L_y} \int_0^{L_x} \varphi^2 dx dy. \quad (1.4.11)$$

Умножив уравнение Пуассона на $n-N$ и интегрируя по области полупроводника, получим:

$$((N-n), \Delta \varphi) = -\gamma \|N-n\|_{L_2}^2 \quad (1.4.12)$$

или

$$(\nabla(N-n), \nabla \varphi) = \gamma \|N-n\|_{L_2}^2. \quad (1.4.13)$$

Далее, взяв модуль от левой части уравнения (1.4.13) и используя равенство Коши-Буняковского и ε -равенство, запишем:

$$\gamma \|N-n\|_{L_2}^2 \leq \varepsilon_1 \|\nabla(N-n)\|_{L_2}^2 + \frac{1}{4\varepsilon_1} \|\nabla \varphi\|_{L_2}^2, \quad \varepsilon_1 > 0. \quad (1.4.14)$$

Из (1.4.10) и (1.4.14) следуют два неравенства:

$$\|\nabla \varphi\|_{L_2}^2 \left(1 - \frac{\varepsilon}{4\varepsilon_1} \right) \leq \varepsilon_1 \varepsilon \|\nabla(N-n)\|_{L_2}^2 + \frac{\gamma}{4\varepsilon} \|\varphi\|_{L_2}^2, \quad (1.4.15)$$

$$\|N-n\|_{L_2}^2 \left(1 - \frac{\varepsilon}{4\varepsilon_1} \right) \leq \frac{\varepsilon_1}{\gamma} \|\nabla(N-n)\|_{L_2}^2 + \frac{1}{4\varepsilon \varepsilon_1} \|\nabla \varphi\|_{L_2}^2. \quad (1.4.16)$$

Следовательно, норма L_2 градиента потенциала электрического поля ограничена, если ограничена аналогичная норма от градиента разности концентраций заряженных частиц. Норма L_2 потенциала электрического поля ограничена, так как решение для линейного уравнения Пуассона существует. Эти оценки могут быть использованы для доказательства существования

решения задачи на маленьком временном интервале, а также для доказательства существования решения разностной задачи. Очевидно, что для последнего случая следует использовать разностные аналоги записанных равенств.

1.4.5 Ограниченность коэффициента поглощения оптической энергии

Учитывая, что значения концентрации ионизированных доноров N не превышают единицы, а концентрация свободных электронов n положительна, для коэффициента поглощения (1.1.7) записывается следующая оценка:

$$\delta(n, N) \leq \delta_{\max} = e^{-\psi + \xi \psi n_{\max}}, \quad n_{\max} = \max_{x, y, t} n(x, y, t) \quad (1.4.17)$$

справедливая для достаточного малого временного интервала $t \in [0, t_\varepsilon]$.

Возможно записать и более слабую оценку. Для этого запишем уравнения (1.1.1) и (1.1.2) в следующем виде:

$$\frac{\partial}{\partial t} (n + (1 - N)) = D_x \frac{\partial J_x}{\partial x} + D_y \frac{\partial J_y}{\partial y}. \quad (1.4.18)$$

где $J_x = \frac{\partial n}{\partial x} - \mu_x n \frac{\partial \varphi}{\partial x}$, $J_y = \frac{\partial n}{\partial y} - \mu_y n \frac{\partial \varphi}{\partial y}$ – электрический поток.

Из (1.4.18) следует, что изменение суммы концентраций происходит из-за потока свободных электронов. Очевидно, что на маленьком временном интервале $t \in [0, t_\varepsilon]$, величина которого зависит от коэффициентов диффузии, эти потоки приблизительно равны нулю и производные по времени в (1.4.18) также равны нулю. В этом случае, можно считать, что концентрации свободных электронов и ионизированных доноров равны (это утверждение подтверждается численным моделированием, так как скорость диффузии ограничена величиной коэффициентов диффузии и пространственным распределением концентрации свободных электронов). Поэтому, на первом этапе взаимодействия оптического импульса с полупроводником (в течение короткого временного интервала) и для качественного анализа зависимости коэффициента поглощения от концентрации n , рассмотрим аппроксимацию коэффициента поглощения в виде:

$$\delta(n, N) = \delta(n) = (1 - n)e^{-\psi(1 - \xi n)}. \quad (1.4.19)$$

Чтобы найти максимум этой функции, возьмем первую и вторую производные по n :

$$\frac{\partial \delta}{\partial n} = (\psi \xi (1-n) - 1) e^{-\psi(1-\xi n)}, \quad (1.4.20)$$

$$\frac{\partial^2 \delta(n^*)}{\partial n^2} = -\psi \xi e^{-\psi + \psi \xi - 1} < 0. \quad (1.4.21)$$

При значении концентрации свободных электронов $n^* = 1 - 1/(\psi \xi)$ первая производная (1.4.20) равна нулю, а вторая производная (1.4.21) при этом значении отрицательна.

Таким образом, в зависимости от значения произведения $\psi \xi$ возможны три случая зависимости коэффициента поглощения от концентрации свободных электронов, которые представлены на Рис. 1.4.1.

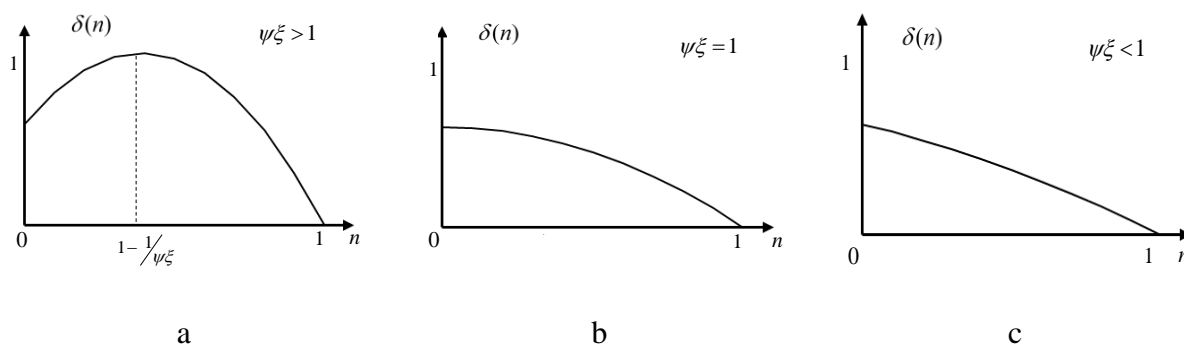


Рис.1.4.1. Качественная зависимость коэффициента поглощения от концентрации свободных электронов при различных значениях произведения параметров $\psi \xi$.

Из Рис. 1.4.1 (а) следует, что если произведение $\psi \xi$ больше единицы, то функция $\delta(n)$ принимает одинаковые значения для двух разных значений концентрации свободных электронов n . Максимальное значение коэффициента поглощения определяется по формуле:

$$\delta_{\max} = \begin{cases} \frac{1}{\psi \xi} e^{-\psi + \psi \xi}, & \psi \xi > 1, \\ e^{-\psi + \psi \xi}, & \psi \xi \leq 1. \end{cases} \quad (1.4.22)$$

1.4.6 Условия существования оптической бистабильности

Для описания условий существования оптической бистабильности обычно анализируется точечная модель, описанная в [29]. Согласно ей:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \delta(n)I_{in} - \frac{n}{\tau_{eff}}, \quad (1.4.23)$$

где τ_{eff} характеризует сток свободных электронов с оси лазерного луча по координате x . I_{in} – интенсивность входящего лазерного импульса в центре полупроводника: $I_{in} = I(0.5 \cdot L_x, 0, t)$. При записи уравнения (1.4.23) среда рассматривается как оптически тонкой слой, т. к. разница между концентрациями ионизированных доноров и свободных электронов незначительна. Таким образом для коэффициента поглощения справедливо представление (1.4.19).

Согласно (1.4.23) связь между интенсивностью лазерного луча и концентрацией свободных электронов в случае, когда полупроводник находится в стационарном состоянии ($\frac{\partial n}{\partial t} = 0$), описывается следующим уравнением:

$$\delta(n)I_{in} - \frac{n}{\tau_{eff}} = 0. \quad (1.4.24)$$

Таким образом производная $\frac{dI_{in}}{dn}$ равна нулю, если имеет корни квадратное уравнение:

$$n^2 - n + 1/\xi\psi = 0. \quad (1.4.25)$$

Очевидно, что если $\xi\psi < 4$, то уравнение (1.4.25) не имеет вещественных корней (рис. 1.4.2 а). Если $\xi\psi = 4$, то существует только один корень (рис. 1.4.2 б). В этом случае происходит резкое увеличение концентрации свободных электронов при небольшом росте интенсивности падающего импульса. В последнем случае, когда $\xi\psi > 4$, существуют два решения (рис. 1.4.2 с):

$$n_{\downarrow\uparrow} = \frac{1 \pm \sqrt{1 - 4/\xi\psi}}{2}. \quad (1.4.26)$$

Так как параметры ξ и ψ положительны, то произведение $\xi\psi > 0$ и концентрация свободных электронов лежит на интервале от 0 до 1: $0 < n < 1$.

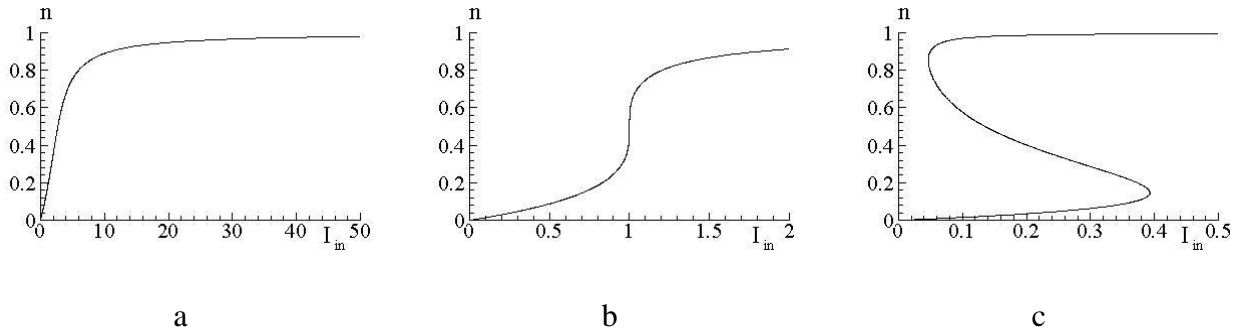


Рис. 1.4.2. Зависимость концентрации свободных электронов n от интенсивности падающего лазерного импульса I_{in} при ее расчете в рамках точечной модели (1.4.24) для параметров: $\tau_{eff} = 1$, $\psi = 2$, $\xi = 1$ (a), 2 (b), 4 (c).

Согласно точечной модели интенсивность импульса, прошедшего через полупроводник, I_{out} выражается через интенсивность входящего импульса I_{in} с помощью следующего соотношения:

$$I_{out}(n) = I_{in} e^{-\tilde{\delta}_0 \delta(n)}, \quad (1.4.27)$$

где $\tilde{\delta}_0$ – эффективное поглощение. С учетом уравнения (1.4.24) оно записывается в следующем виде:

$$I_{out}(n) = \frac{n}{\delta(n)\tau_{eff}} e^{-\tilde{\delta}_0 \delta(n)}. \quad (1.4.28)$$

Наглядная демонстрация данной зависимости для случая, соответствующего рис. 1.4.2, представлена на рис. 1.4.3.

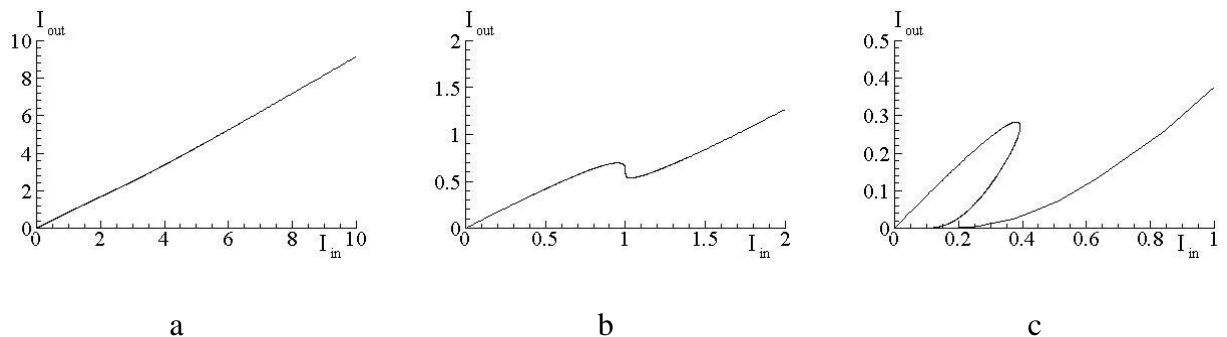


Рис. 1.4.3. Зависимость интенсивности выходящего из полупроводника лазерного импульса I_{out} от интенсивности падающего лазерного импульса I_{in} при ее расчете в рамках точечной модели (1.4.24) для параметров: $\tau_{eff} = 1$, $\tilde{\delta}_0 = 1$, $\psi = 2$, $\xi = 1$ (a), 2 (b), 4 (c).

1.4.7 Оценка решения уравнения Шредингера

Для системы уравнений (1.1.1) – (1.1.3), (1.1.12) запишем интегральное соотношение относительно решения уравнения Шредингера (1.1.12). Для этого умножим уравнение Шредингера, записанного относительно комплексной амплитуды A , на сопряженное A^* , а сопряженное уравнение Шредингера – на функцию A и затем просуммируем полученные уравнения и проинтегрируем эту сумму:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \int_{-L_y}^{L_y} \int_0^{L_x} |A|^2 dx dy + iD_{A_x} \int_{-L_y}^{L_y} \int_0^{L_x} \left(A^* \frac{\partial^2 A}{\partial x^2} - A \frac{\partial^2 A^*}{\partial x^2} \right) dx dy + iD_{A_y} \int_{-L_y}^{L_y} \int_0^{L_x} \left(A^* \frac{\partial^2 A}{\partial y^2} - A \frac{\partial^2 A^*}{\partial y^2} \right) dx dy + \\ & + \beta_A \delta_0 \int_{-L_y}^{L_y} \int_0^{L_x} \delta(n, N) |A|^2 dx dy = 0. \end{aligned} \quad (1.4.29)$$

Интегрируя по частям второй и третий член уравнения (1.4.29) и учитывая однородные граничные условия для функции A (1.1.14), получаем равенства:

$$\int_{-L_y}^{L_y} \int_0^{L_x} \left(A^* \frac{\partial^2 A}{\partial x^2} - A \frac{\partial^2 A^*}{\partial x^2} \right) dx dy = 0, \quad \int_{-L_y}^{L_y} \int_0^{L_x} \left(A^* \frac{\partial^2 A}{\partial y^2} - A \frac{\partial^2 A^*}{\partial y^2} \right) dx dy = 0. \quad (1.4.30)$$

Из этого следует интегральное равенство (инвариант энергии)

$$\int_{-L_y}^{L_y} \int_0^{L_x} \left(\frac{\partial}{\partial t} |A|^2 + \beta_A \delta_0 \delta(n, N) |A|^2 \right) dx dy = 0. \quad (1.4.31)$$

Используя (1.4.31), получим оценку нормы амплитуды A в норме L_2 . Предположим, что решение задачи (1.1.1) – (1.1.3), (1.1.12) существует и справедливо равенство (учитывая (1.4.17)):

$$\delta_{\min} \leq \delta(n, N) \leq \delta_{\max}, \quad \delta_{\min}, \delta_{\max} > 0. \quad (1.4.32)$$

Учитывая вид коэффициента поглощения (1.1.7), запишем два неравенства:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{-L_y}^{L_y} \int_0^{L_x} |A|^2 dx dy + \beta_A \delta_0 \delta_{\min} \int_{-L_y}^{L_y} \int_0^{L_x} |A|^2 dx dy \leq 0, \quad (1.4.33)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{-L_y}^{L_y} \int_0^{L_x} |A|^2 dx dy + \beta_A \delta_0 \delta_{\max} \int_{-L_y}^{L_y} \int_0^{L_x} |A|^2 dx dy \geq 0. \quad (1.4.34)$$

Если ввести норму L_2 для комплексной амплитуды A следующим образом:

$$\|A\|_{L_2}^2 = (A, A) = \int_{-L_y}^{L_y} \int_0^{L_x} AA^* dx dy = \int_{-L_y}^{L_y} \int_0^{L_x} |A|^2 dx dy, \quad (1.4.35)$$

которая характеризует энергию импульса, тогда получится следующая оценка ее изменения по времени:

$$\|A\|_{L_2}^2 \leq \|A_0\|_{L_2}^2 e^{-\beta_A \delta_0 \delta_{\min} t}, \quad (1.4.36)$$

$$\|A\|_{L_2}^2 \geq \|A_0\|_{L_2}^2 e^{-\beta_A \delta_0 \delta_{\max} t}. \quad (1.4.37)$$

Следовательно, энергия оптического импульса со временем уменьшается, но ее величина всегда положительна.

1.4.8 Ускорение оптического импульса при учете его отражения от поверхности полупроводника

Из уравнения Шредингера (1.1.12) также возможно записать два других интегральных соотношения, которые характеризуют распространение энергии импульса по координатам x и y . Для этого домножим уравнение Шредингера, записанное относительно комплексной амплитуды

A на производную по координате x сопряженной функции $\frac{\partial A^*}{\partial x}$; а сопряженное уравнение

Шредингера – на производную $\frac{\partial A}{\partial x}$, и затем вычтем одно уравнение из другого. После

интегрирования разности уравнений получаем:

$$\begin{aligned} & \int_{-L_y}^{L_y} \int_0^{L_x} \left(\frac{\partial A}{\partial t} \frac{\partial A^*}{\partial x} - \frac{\partial A^*}{\partial t} \frac{\partial A}{\partial x} \right) dx dy + iD_{A_x} \int_{-L_y}^{L_y} \int_0^{L_x} \left(\frac{\partial^2 A}{\partial x^2} \frac{\partial A^*}{\partial x} + \frac{\partial^2 A^*}{\partial x^2} \frac{\partial A}{\partial x} \right) dx dy + \\ & + iD_{A_y} \int_{-L_y}^{L_y} \int_0^{L_x} \left(\frac{\partial^2 A}{\partial y^2} \frac{\partial A^*}{\partial x} + \frac{\partial^2 A^*}{\partial y^2} \frac{\partial A}{\partial x} \right) dx dy + 0.5\beta_A \delta_0 \int_{-L_y}^{L_y} \int_0^{L_x} \delta(n, N) \left(A \frac{\partial A^*}{\partial x} - A^* \frac{\partial A}{\partial x} \right) dx dy = 0. \end{aligned} \quad (1.4.38)$$

Применяя интегрирование по частям ко второму и третьему членам (1.4.38) и учитывая, что значение функций A , A^* и их производных стремится к нулю вблизи границ домена, получим следующие равенства:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{-L_y}^{L_y} \int_0^{L_x} \text{Im}\left(A \frac{\partial A^*}{\partial x}\right) dx dy + \beta_A \delta_0 \int_{-L_y}^{L_y} \int_0^{L_x} \delta(n, N) \text{Im}\left(A \frac{\partial A^*}{\partial x}\right) dx dy = 0, \quad (1.4.39)$$

или

$$\int_{-L_y}^{L_y} \int_0^{L_x} \text{Im}\left(A \frac{\partial A^*}{\partial x}\right) dx dy + \beta_A \delta_0 \int_0^t \int_{-L_y}^{L_y} \int_0^{L_x} \delta(n, N) \text{Im}\left(A \frac{\partial A^*}{\partial x}\right) dx dy d\eta = \int_{-L_y}^{L_y} \int_0^{L_x} \text{Im}\left(A_0 \frac{\partial A_0^*}{\partial x}\right) dx dy, \quad (1.4.40)$$

где Im обозначает мнимую часть комплексных функций.

Используя формулу Эйлера, представим функцию A в виде:

$$A = \bar{A} \cdot e^{iS}, \quad (1.4.41)$$

где введенные дополнительные функции \bar{A} , S - действительные. Тогда получится следующее интегральное соотношение:

$$\int_{-L_y}^{L_y} \int_0^{L_x} \bar{A}^2 \frac{\partial S}{\partial x} dx dy + \beta_A \delta_0 \int_0^t \int_{-L_y}^{L_y} \int_0^{L_x} \delta(n, N) \bar{A}^2 \frac{\partial S}{\partial x} dx dy d\eta = \int_{-L_y}^{L_y} \int_0^{L_x} \bar{A}_0^2 \frac{\partial S_0}{\partial x} dx dy. \quad (1.4.42)$$

Если начальное распределение фазы импульса S_0 не содержит нечетные степени от $x - L_{xc}$ и начальное распределение функции \bar{A}_0 симметрично вдоль координаты x относительно точки L_{xc} . Тогда интеграл в правой части равенства (1.4.42) равен нулю. В этом случае функции $\delta(n, N)$ и \bar{A} симметричны по координате x относительно точки L_{xc} и, следовательно, первый интеграл в (1.4.42) также будет равен нулю:

$$\int_{-L_y}^{L_y} \int_0^{L_x} \bar{A}^2 \frac{\partial S}{\partial x} dx dy = 0. \quad (1.4.43)$$

Последнее утверждение легко доказать если заменить x на $-x$ и учесть симметрию начального распределения комплексной амплитуды по этой координате. Интеграл (1.4.43) можно использовать для контроля результатов компьютерного моделирования.

Аналогичным образом, получается соотношение:

$$\int_{-L_y}^{L_y} \int_0^{L_x} \text{Im}\left(A \frac{\partial A^*}{\partial y}\right) dx dy + \beta_A \delta_0 \int_0^t \int_{-L_y}^{L_y} \int_0^{L_x} \delta(n, N) \text{Im}\left(A \frac{\partial A^*}{\partial y}\right) dx dy d\eta = \int_{-L_y}^{L_y} \int_0^{L_x} \text{Im}\left(A_0 \frac{\partial A_0^*}{\partial y}\right) dx dy \quad (1.4.44)$$

или, учитывая (1.4.41):

$$\int_{-L_y}^{L_y} \int_0^{L_x} \bar{A}^2 \frac{\partial S}{\partial y} dx dy + \beta_A \delta_0 \int_0^t \int_{-L_y}^{L_y} \int_0^{L_x} \delta(n, N) \bar{A}^2 \frac{\partial S}{\partial y} dx dy d\eta = \int_{-L_y}^{L_y} \int_0^{L_x} \bar{A}_0^2 \frac{\partial S_0}{\partial y} dx dy. \quad (1.4.45)$$

Для начального условия (1.1.13) это равенство может быть переписано в виде:

$$\int_{-L_y}^{L_y} \int_0^{L_x} \bar{A}^2 \frac{\partial S}{\partial y} dx dy + \beta_A \delta_0 \int_0^t \int_{-L_y}^{L_y} \int_0^{L_x} \delta(n, N) \bar{A}^2 \frac{\partial S}{\partial y} dx dy d\eta = -2\pi\chi \int_{-L_y}^{L_y} \int_0^{L_x} \bar{A}_0^2 dx dy = const. \quad (1.4.46)$$

Известно, что первая производная от распределения фронта волны по пространственной координате характеризует распространение оптического импульса вдоль этой координаты. Учет отражения части импульса от поверхности полупроводника от границ доменов высокого поглощения приводит к изменению знака производной для части импульса. Следовательно, модуль соответствующей производной для другой части импульса должен увеличиться. Это приведет к ускорению движения оптического импульса, что подтверждается результатами компьютерного моделирования (см. §4.4).

1.4.9 Третий инвариант (Гамильтониан) для уравнения Шредингера

Другое интегральное отношение, схоже с Гамильтонианом для уравнения Шредингера, может быть получено, если умножить данное уравнение, записанное относительно комплексной амплитуды A на производную по времени от сопряженной функции $\frac{\partial A^*}{\partial t}$, а сопряженное уравнение Шредингера – на производную $\frac{\partial A}{\partial t}$, и вычтем эти уравнения. После интегрирования их разности получим:

$$iD_{A_x} \int_{-L_y}^{L_y} \int_0^{L_x} \left(\frac{\partial^2 A}{\partial x^2} \frac{\partial A^*}{\partial t} + \frac{\partial^2 A^*}{\partial x^2} \frac{\partial A}{\partial t} \right) dx dy + iD_{A_y} \int_{-L_y}^{L_y} \int_0^{L_x} \left(\frac{\partial^2 A}{\partial y^2} \frac{\partial A^*}{\partial t} + \frac{\partial^2 A^*}{\partial y^2} \frac{\partial A}{\partial t} \right) dx dy + 0.5\beta_A \delta_0 \int_{-L_y}^{L_y} \int_0^{L_x} \delta(n, N) \left(A \frac{\partial A^*}{\partial t} - A^* \frac{\partial A}{\partial t} \right) dx dy = 0. \quad (1.4.47)$$

Применяя интегрирование по частям к двум членам равенства (1.4.47) и учитывая, что значение функций A , A^* и их производных стремится к нулю вблизи границ домена, получим следующие равенства:

$$-i \frac{\partial}{\partial t} \int_{-L_y}^{L_y} \int_0^{L_x} \left(D_{A_x} \left| \frac{\partial A}{\partial x} \right|^2 + D_{A_y} \left| \frac{\partial A}{\partial y} \right|^2 \right) dx dy + 0.5 \beta_A \delta_0 \int_{-L_y}^{L_y} \int_0^{L_x} \delta(n, N) \left(A \frac{\partial A^*}{\partial t} - A^* \frac{\partial A}{\partial t} \right) dx dy = 0 \quad (1.4.48)$$

или

$$\int_{-L_y}^{L_y} \int_0^{L_x} \left(D_{A_x} \left| \frac{\partial A}{\partial x} \right|^2 + D_{A_y} \left| \frac{\partial A}{\partial y} \right|^2 \right) dx dy = I_{30} + \beta_A \delta_0 \int_0^t \int_{-L_y}^{L_y} \int_0^{L_x} \delta(n, N) \operatorname{Im} \left(A \frac{\partial A^*}{\partial \eta} \right) dx dy d\eta, \quad (1.4.49)$$

$$\text{где } I_{30} = \int_{-L_y}^{L_y} \int_0^{L_x} \left(D_{A_x} \left| \frac{\partial A_0}{\partial x} \right|^2 + D_{A_y} \left| \frac{\partial A_0}{\partial y} \right|^2 \right) dx dy.$$

Используя представление (1.4.41), запишем равенство (1.4.49) в виде:

$$\begin{aligned} & \int_{-L_y}^{L_y} \int_0^{L_x} \left(D_{A_x} \left(\frac{\partial \bar{A}}{\partial x} \right)^2 + D_{A_y} \left(\frac{\partial \bar{A}}{\partial y} \right)^2 + \bar{A}^2 \left(D_{A_x} \left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 + D_{A_y} \left(\frac{\partial S}{\partial y} \right)^2 \right) \right) dx dy = \\ & = I_{30} - \beta_A \delta_0 \int_0^t \int_{-L_y}^{L_y} \int_0^{L_x} \delta(n, N) \bar{A}^2 \frac{\partial S}{\partial \eta} dx dy d\eta. \end{aligned} \quad (1.4.50)$$

Чтобы упростить (1.4.50), перепишем уравнение (1.1.12) относительно функций \bar{A} , S :

$$\bar{A} \frac{\partial S}{\partial t} + D_{A_x} \left(\frac{\partial^2 \bar{A}}{\partial x^2} - \bar{A} \left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 \right) + D_{A_y} \left(\frac{\partial^2 \bar{A}}{\partial y^2} - \bar{A} \left(\frac{\partial S}{\partial y} \right)^2 \right) = 0, \quad (1.4.51)$$

$$\frac{\partial \bar{A}^2}{\partial t} - 2D_{A_x} \frac{\partial}{\partial x} \left(\bar{A}^2 \frac{\partial S}{\partial x} \right) - 2D_{A_y} \frac{\partial}{\partial y} \left(\bar{A}^2 \frac{\partial S}{\partial y} \right) + \beta_A \delta_0 \delta(n, N) \bar{A}^2 = 0. \quad (1.4.52)$$

Используя (1.4.51), равенство (1.4.50) приводится к виду:

$$\begin{aligned} & \int_{-L_y}^{L_y} \int_0^{L_x} \left(D_{A_x} \left(\left(\frac{\partial \bar{A}}{\partial x} \right)^2 + \bar{A} \frac{\partial^2 \bar{A}}{\partial x^2} \right) + D_{A_y} \left(\left(\frac{\partial \bar{A}}{\partial y} \right)^2 + \bar{A} \frac{\partial^2 \bar{A}}{\partial y^2} \right) + \bar{A}^2 \frac{\partial S}{\partial t} \right) dx dy = \\ & = I_{30} - \beta_A \delta_0 \int_0^t \int_{-L_y}^{L_y} \int_0^{L_x} \delta(n, N) \bar{A}^2 \frac{\partial S}{\partial \eta} dx dy d\eta. \end{aligned} \quad (1.4.53)$$

Применяя интегрирование по частям к (1.4.53) и учитывая, что значение функции \bar{A} и ее соответствующих производных стремится к нулю вблизи границ домена, получим следующее выражение:

$$\int_{-L_y}^{L_y} \int_0^{L_x} \left(A^2 \frac{\partial S}{\partial t} \right) dx dy = I_{30} - \beta_A \delta_0 \int_0^t \int_{-L_y}^{L_y} \int_0^{L_x} \delta(n, N) \bar{A}^2 \frac{\partial S}{\partial \eta} dx dy d\eta \quad (1.4.54)$$

или

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{-L_y}^{L_y} \int_0^{L_x} \left(A^2 \frac{\partial S}{\partial t} \right) dx dy + \beta_A \delta_0 \int_{-L_y}^{L_y} \int_0^{L_x} \delta(n, N) \bar{A}^2 \frac{\partial S}{\partial t} dx dy = 0. \quad (1.4.55)$$

Это интегральное соотношение может быть использовано для контроля результатов компьютерного моделирования.

Если ввести функцию

$$F = \int_0^t \delta(n, N) \bar{A}^2 \frac{\partial S}{\partial \eta} d\eta, \quad (1.4.56)$$

то выражение (1.4.54) записывается в виде:

$$\int_{-L_y}^{L_y} \int_0^{L_x} \frac{1}{\delta(n, N)} \frac{\partial}{\partial t} \left(F \cdot e^{\beta_A \delta_0 t} \right) dx dy = I_{30} e^{\beta_A \delta_0 t}. \quad (1.4.57)$$

Так как правая часть равенства (1.4.57) положительна, значит интеграл в левой части (1.4.57) должен быть также положительным. Функция $\delta(n, N)$ тоже положительна. Таким образом, используя выражение (1.4.32) для коэффициента поглощения и после некоторых преобразований, получается следующая оценка:

$$\left| \int_{-L_y}^{L_y} \int_0^{L_x} \delta(n, N) \bar{A}^2 \frac{\partial S}{\partial t} dx dy \right| \leq I_{30} \delta_{\max} e^{-\beta_A \delta_0 t}. \quad (1.4.58)$$

Более того, из (1.4.58) следует

$$\left| \int_{-L_y}^{L_y} \int_0^{L_x} \bar{A}^2 \frac{\partial S}{\partial t} dx dy \right| \leq \frac{\delta_{\max}}{\delta_{\min}} I_{30} e^{-\beta_A \delta_0 t}. \quad (1.4.59)$$

Из равенства (1.4.36) – (1.4.37) и положительности функции \bar{A}^2 , следует, что изменение фазы импульса S будет ограничено и в норме L_2 , и в норме C .

§1.5. Краткие выводы

В главе 1 сформулированы 2D и 3D постановки задачи взаимодействия оптического импульса с полупроводником. Математическая модель данного процесса представляет собой системы безразмерных дифференциальных уравнений в частных производных с соответствующими начальными и граничными условиями. Рассмотрены случаи постановок однородных и неоднородных граничных условий, описывающих отсутствие или присутствие воздействия внешнего электрического поля на полупроводник соответственно. Сформулированы задачи нахождения согласованных начальных распределений характеристик полупроводника.

Для описания рассматриваемого физического процесса предложена новая математическая модель, учитывающая дифракцию падающего оптического излучения вдоль координаты его распространения. В этом случае распространение оптического импульса описывается уравнением Шрёдингера, записанным относительно его амплитуды, которая медленно изменяется по временной и поперечной координатам и быстро изменяется по продольной координате.

Приведены критерии выделения единственного решения задачи Неймана для уравнения Пуассона, входящего в систему нелинейных нестационарных дифференциальных уравнений.

С помощью аналитического исследования получены оценки для решения 2D задачи воздействия оптического импульса на полупроводник при однородных граничных условиях. Показана ограниченность концентраций заряженных частиц, потенциала электрического поля и коэффициента поглощения (модель концентрационной ОБ). Показано существование и единственность решения задачи (1.1.1) – (1.1.3), (1.1.12), предложены подход к доказательству существования и единственности решения уравнения относительно концентрации свободных электронов. Для уравнения Шрёдингера относительно комплексной амплитуды падающего импульса на основе полученных интегральных соотношений показано, что энергия импульса уменьшается со временем, но всегда остается положительной; учет отражения части импульса от поверхности полупроводника приводит к ускорению распространения импульса; изменение фазы импульса ограничено в нормах L_2 и C .

Глава 2. Разностные схемы для поставленных задач взаимодействия оптического импульса с полупроводником

§2.1. Консервативные разностные схемы для 2D задачи распространения оптического импульса в полупроводнике

При работе над параграфом использовались материалы из публикаций автора [А6, А9, А10, А12, А15].

2.1.1. Разностная схема для 2D задачи распространения оптического импульса в полупроводнике без учета продольной дифракции

Для построения разностной схемы для системы уравнений (1.1.1) – (1.1.4) в области

$$G = \{0 \leq x \leq L_x\} \times \{0 \leq y \leq L_y\} \times \{0 \leq t \leq L_t\}$$

введем равномерные сетки $\Omega = \omega_x \times \omega_y \times \omega_t$ и $\bar{\Omega}' = \omega'_x \times \omega'_y \times \bar{\omega}_t$:

$$\begin{aligned} \omega_x &= \{x_l = lh_x, l = \overline{0, P_x}, h_x = L_x/P_x\}, \\ \omega_y &= \{y_j = jh_y, j = \overline{0, P_y}, h_y = L_y/P_y\}, \quad \omega'_y = \{y'_j = (j-0.5)h_y, j = \overline{0, P_y+1}, h_y = L_y/P_y\}, \\ \omega_t &= \{t_m = m\tau, m = \overline{0, P_t}, \tau = L_t/P_t\}, \quad \bar{\omega}_t = \{\bar{t}_m = (m-0.5)\tau, m = \overline{1, P_t}, \tau = L_t/P_t\}. \end{aligned} \quad (2.1.1)$$

Определим сеточные функции n_h, N_h, φ_h на Ω , сеточную функцию I_h на $\bar{\Omega}'$ следующим образом:

$$n_{ij}^m = n(x_l, y_j, t_m), \quad N_{ij}^m = N(x_l, y_j, t_m), \quad \varphi_{ij}^m = \varphi(x_l, y_j, t_m), \quad I_{ij}^m = I(x_l, y'_j, \bar{t}_m). \quad (2.1.2)$$

Сеточная функция I_h задается на сдвинутой сетке для получения второго порядка аппроксимации по времени и пространству.

Для компактности записи разностной схемы ниже используются следующие безиндексные обозначения:

$$\begin{aligned} f &= f_{ij}^m, \quad f_{l\pm 1} = f_{l\pm 1j}^m, \quad f_{j\pm 1} = f_{ij\pm 1}^m, \quad \hat{f} = f_{ij}^{m+1}, \\ f_{l\pm 0.5} &= (f_l + f_{l\pm 1})/2, \quad f_{j\pm 0.5} = (f_j + f_{j\pm 1})/2, \quad \overset{0.5}{f} = (\hat{f} + f)/2, \end{aligned} \quad (2.1.3)$$

где f – одна из функций n_h, N_h, φ_h .

Для функции, описывающей эволюцию интенсивности оптического излучения, используются следующие обозначения:

$$I^m = I_{ij}^m, \quad \hat{I}^m = I_{ij+1}^m, \quad \overset{0.5}{I} = 0.5(I_{ij}^{m+1} + I_{ij+1}^{m+1}). \quad (2.1.4)$$

Сеточные функции G_h, R_h, δ_h и $\hat{G}_h, \hat{R}_h, \hat{\delta}_h$ на нижнем и верхнем временных слоях определяются следующим образом:

$$\begin{aligned} G_h &= G(n, N, \varphi, \overset{0.5}{I}), \quad R_h = R(n, N), \quad \delta_h = \delta(n, N, \varphi), \\ \hat{G}_h &= G(\hat{n}, \hat{N}, \hat{\varphi}, \overset{0.5}{I}), \quad \hat{R}_h = R(\hat{n}, \hat{N}), \quad \hat{\delta}_h = \delta(\hat{n}, \hat{N}, \hat{\varphi}), \\ \overset{0.5}{G} &= (\hat{G}_h + G_h)/2, \quad \overset{0.5}{R} = (\hat{R}_h + R_h)/2, \quad \overset{0.5}{\delta} = (\hat{\delta}_h + \delta_h)/2. \end{aligned} \quad (2.1.5)$$

Первая и вторая разностные производные аппроксимируются стандартным образом:

$$\begin{aligned} f_x &= \frac{f_{l+1} - f}{h_x}, \quad f_{\bar{x}} = \frac{f - f_{l-1}}{h_x}, \quad f_y = \frac{f_{j+1} - f}{h_y}, \quad f_{\bar{y}} = \frac{f - f_{j-1}}{h_y}, \\ f_{\bar{x}\bar{x}} &= \frac{f_{l+1} - 2f + f_{l-1}}{h_x^2}, \quad f_{\bar{y}\bar{y}} = \frac{f_{j+1} - 2f + f_{j-1}}{h_y^2}. \end{aligned} \quad (2.1.6)$$

Вводится разностный аналог оператора Лапласа:

$$\Lambda \varphi = \varphi_{\bar{x}\bar{x}} + \varphi_{\bar{y}\bar{y}}. \quad (2.1.7)$$

Для удобства записи разностной схемы также вводятся следующие разностные операторы:

$$\begin{aligned} Z_{\bar{x}\bar{x}}(n, \varphi) &= \frac{\mu_x}{h_x} (n_{l+0.5} \varphi_x - n_{l-0.5} \varphi_{\bar{x}}), \quad \overset{0.5}{Z}_{\bar{x}\bar{x}}(n, \varphi) = (Z_{\bar{x}\bar{x}}(\hat{n}, \hat{\varphi}) + Z_{\bar{x}\bar{x}}(n, \varphi))/2, \\ Z_{\bar{y}\bar{y}}(n, \varphi) &= \frac{\mu_y}{h_y} (n_{j+0.5} \varphi_y - n_{j-0.5} \varphi_{\bar{y}}), \quad \overset{0.5}{Z}_{\bar{y}\bar{y}}(n, \varphi) = (Z_{\bar{y}\bar{y}}(\hat{n}, \hat{\varphi}) + Z_{\bar{y}\bar{y}}(n, \varphi))/2. \end{aligned} \quad (2.1.8)$$

С учетом введенных обозначений, для системы (1.1.1) – (1.1.4) строится неявная симметричная разностная схема (схема Кранка-Николсона):

$$\frac{\hat{N} - N}{\tau} = G - R, \quad l = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{0, P_y}, \quad (2.1.9)$$

$$\frac{\hat{n} - n}{\tau} = \kappa_x \left(n_{\bar{x}\bar{x}} - Z_{\bar{x}\bar{x}}(n, \varphi) \right) + \kappa_y \left(n_{\bar{y}\bar{y}} - Z_{\bar{y}\bar{y}}(n, \varphi) \right) + G - R, \quad l = \overline{1, P_x - 1}, \quad j = \overline{1, P_y - 1}, \quad (2.1.10)$$

$$\Lambda \varphi = \gamma(n - N), \quad l = \overline{1, P_x - 1}, \quad j = \overline{1, P_y - 1}, \quad (2.1.11)$$

$$\frac{\hat{I}^{m+1} - I^{m+1}}{h_y} + \delta_0 \delta I = 0, \quad l = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{0, P_y}. \quad (2.1.12)$$

Граничные условия (1.1.5) – (1.1.6) аппроксимируются с 1 порядком по пространству и 2 по времени:

$$\begin{aligned} \hat{\varphi}_{x,0j} = \hat{\varphi}_{\bar{x},P_x j} = -E_x, \quad \hat{n}_{x,0j} + \mu_x \hat{n}_{0.5j} E_x = \hat{n}_{\bar{x},P_x j} + \mu_x \hat{n}_{P_x - 0.5j} E_x = 0, \quad j = \overline{0, P_y}, \\ \hat{\varphi}_{y,l0} = \hat{\varphi}_{\bar{y},lP_y} = -E_y, \quad \hat{n}_{y,l0} + \mu_y \hat{n}_{l0.5} E_y = \hat{n}_{\bar{y},lP_y} + \mu_y \hat{n}_{lP_y - 0.5} E_y = 0, \quad l = \overline{0, P_x}. \end{aligned} \quad (2.1.13)$$

Интенсивность падающего оптического импульса I (1.1.10) задается следующим образом:

$$I_{l0}^{m+1} = e^{-\frac{(x_l - 0.5L_x)^2}{a_x^2}} \left(1 - e^{-10\bar{l}_{m+1}} \right), \quad l = \overline{0, P_x}, \quad m \geq 0. \quad (2.1.14)$$

В начальный момент времени оптическое излучение отсутствует (1.1.11):

$$I_{lj}^0 = 0, \quad l = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{0, P_y + 1}. \quad (2.1.15)$$

Разностная схема для нахождения начального распределения сеточных функций n , N , φ будет рассмотрена в §2.7.

В рассматриваемом случае консервативность схемы заключается в выполнении разностного аналога закона сохранения заряда (1.1.25) во внутренних узлах сетки Ω :

$$Q = \sum_{l=1}^{P_x-1} \sum_{j=1}^{P_y-1} h_x h_y (n_{lj} - N_{lj}) = 0. \quad (2.1.16)$$

2.1.2. Разностная схема для 2D задачи распространения оптического импульса в полупроводнике с учетом продольной дифракции

Для построения разностной аппроксимации уравнения Шредингера (1.1.12) в расширенной по продольной координате области $\tilde{G} = \{0 \leq x \leq L_x\} \times \{-L_y \leq y \leq L_y\} \times \{0 \leq t \leq L_t\}$ вводится равномерная разностная сетка $\tilde{\Omega} = \omega_x \times \tilde{\omega}_y \times \omega_t$:

$$\begin{aligned}\omega_x &= \{x_l = lh_x, l = \overline{0, P_x}, h_x = L_x/P_x\}, \\ \tilde{\omega}_y &= \{y_j = jh_y, j = \overline{-P_y, P_y}, h_y = L_y/P_y\}, \\ \omega_t &= \{t_m = m\tau, m = \overline{0, P_t}, \tau = L_t/P_t\}.\end{aligned}\tag{2.1.17}$$

Сеточная функция A_h определяется на $\tilde{\Omega}$ следующим образом: $A_{ij}^m = A(x_l, y_j, t_m)$. В дальнейшем для нее будут использоваться безиндексные обозначения (2.1.3) и стандартные обозначения для разностных производных (2.1.6).

Сеточные функции R_h , δ_h и \hat{R}_h , $\hat{\delta}_h$, в случае решения системы (1.1.1) – (1.1.3), (1.1.12), определяются аналогично (2.1.5), однако сеточный аналог функции генерации имеет вид:

$$G_h = G(n, N, \varphi, |A|^2), \quad \hat{G}_h = G(\hat{n}, \hat{N}, \hat{\varphi}, |\hat{A}|^2).\tag{2.1.18}$$

С учетом введенных обозначений, для уравнения (1.1.12) строится неявная симметричная разностная схема:

$$\frac{\hat{A} - A}{\tau} + iD_x^{0.5} A_{\bar{x}x} + iD_y^{0.5} A_{\bar{y}y} + \frac{\beta_A \bar{\delta}_0^{0.5}}{2} \delta A = 0, \quad l = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{-P_y + 1, P_y - 1}.\tag{2.1.19}$$

Сеточный параметр $\bar{\delta}_0$ (максимальное значение коэффициента поглощения) определяется следующим образом:

$$\bar{\delta}_0 = \begin{cases} 0, & j = \overline{-P_y, -1}, \\ 0.5\delta_0, & j = 0, \\ \delta_0, & j = \overline{1, P_y}. \end{cases}\tag{2.1.20}$$

Сеточная функция $\delta^{0.5}$ обращается в нуль при в расчетной области вне полупроводника: $j = \overline{-P_y + 1, -1}$.

Граничные условия (1.1.14) аппроксимируются следующим образом:

$$\hat{A}_{0j} = \hat{A}_{P_x j} = 0, \quad j = \overline{-P_y, P_y}, \quad \hat{A}_{l, -P_y} = \hat{A}_{l, P_y} = 0, \quad l = \overline{0, P_x}. \quad (2.1.21)$$

Начальное значение функции A (1.1.13) на сетке $\tilde{\Omega}$ определяются следующим образом:

$$A_{lj}^0 = e^{-\frac{(x_l - L_{xc})^2}{a_x^2} - \frac{(y_j - L_{yc})^2}{a_y^2} - 2i\pi\chi(y_j - L_{yc})}, \quad l = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{-P_y, P_y}. \quad (2.1.22)$$

2.1.3. Исследование порядка аппроксимации и консервативности 2D разностной схемы

Теорема 2.1.1. Разностная схема (2.1.9) – (2.1.12) аппроксимирует дифференциальную задачу (1.1.1) – (1.1.4) со 2 порядком по времени и пространству относительно точки $(x_l, y_j, t_m + \tau/2)$.

Доказательство. Для определения порядка аппроксимации схем (2.1.9) – (2.1.12) разложим решение дифференциальной задачи (1.1.1) – (1.1.4) в ряд Тейлора относительно точки $(x_l, y_j, t_m + \tau/2)$:

$$f(x_l, y_j, t_m) = f(x_l, y_j, t_m + \tau/2) - \frac{\tau}{2} f'_t(x_l, y_j, t_m + \tau/2) + \frac{\tau^2}{8} f''_{tt}(x_l, y_j, t_m + \tau/2) + O(\tau^3), \quad (2.1.23)$$

$$f(x_l, y_j, t_m + \tau) = f(x_l, y_j, t_m + \tau/2) + \frac{\tau}{2} f'_t(x_l, y_j, t_m + \tau/2) + \frac{\tau^2}{8} f''_{tt}(x_l, y_j, t_m + \tau/2) + O(\tau^3),$$

$$\begin{aligned} f(x_l \pm h_x, y_j, t_m) &= f(x_l, y_j, t_m + \tau/2) \pm h_x f'_x(x_l, y_j, t_m + \tau/2) - \frac{\tau}{2} f'_t(x_l, y_j, t_m + \tau/2) + \\ &+ \frac{h_x^2}{2} f''_{xx}(x_l, y_j, t_m + \tau/2) \mp \frac{\tau h_x}{2} f''_{tx}(x_l, y_j, t_m + \tau/2) + \frac{\tau^2}{8} f''_{tt}(x_l, y_j, t_m + \tau/2) - \\ &- \frac{\tau h_x^2}{4} f'''_{txx}(x_l, y_j, t_m + \tau/2) \pm \frac{\tau^2 h_x}{8} f'''_{ttx}(x_l, y_j, t_m + \tau/2) + O(h_x^3) + O(\tau^3), \end{aligned} \quad (2.1.24)$$

$$\begin{aligned} f(x_l \pm h_x, y_j, t_m + \tau) &= f(x_l, y_j, t_m + \tau/2) \pm h_x f'_x(x_l, y_j, t_m + \tau/2) + \frac{\tau}{2} f'_t(x_l, y_j, t_m + \tau/2) + \\ &+ \frac{h_x^2}{2} f''_{xx}(x_l, y_j, t_m + \tau/2) \pm \frac{\tau h_x}{2} f''_{tx}(x_l, y_j, t_m + \tau/2) + \frac{\tau^2}{8} f''_{tt}(x_l, y_j, t_m + \tau/2) + \\ &+ \frac{\tau h_x^2}{4} f'''_{txx}(x_l, y_j, t_m + \tau/2) \pm \frac{\tau^2 h_x}{8} f'''_{ttx}(x_l, y_j, t_m + \tau/2) + O(\tau^3) + O(h_x^3), \end{aligned} \quad (2.1.25)$$

где f – одна из следующих функций: n , N , φ , предполагая при этом, что соответствующие функции обладают требуемым порядком гладкости.

Подставим разложения (2.1.23) – (2.1.25) в (2.1.6):

$$\begin{aligned}\frac{\hat{f} - f}{\tau} &= f'_t(x_l, y_j, t_m + \tau/2) + O(\tau^2), \\ f_{\bar{x}\bar{x}} &= \frac{f_{l+1} - 2f + f_{l-1}}{h_x^2} = f''_{xx}(x_l, y_j, t_m + \tau/2) - \frac{\tau}{2} f'''_{txx}(x_l, y_j, t_m + \tau/2) + O(h_x^2) + O(\tau^2), \\ \hat{f}_{\bar{x}\bar{x}} &= \frac{\hat{f}_{l+1} - 2\hat{f} + \hat{f}_{l-1}}{h_x^2} = f''_{xx}(x_l, y_j, t_m + \tau/2) + \frac{\tau}{2} f'''_{txx}(x_l, y_j, t_m + \tau/2) + O(h_x^2) + O(\tau^2).\end{aligned}\quad (2.1.26)$$

Выражения для координаты у раскладываются в ряд аналогично.

Применим полученные формулы к разностному оператору (2.1.8):

$$\begin{aligned}Z_{\bar{x}\bar{x}}(n, \varphi) &= \frac{\mu_x}{h_x} (n_{l+0.5}\varphi_x - n_{l-0.5}\varphi_{\bar{x}}) = \mu_x \frac{(n + n_{l+1})(\varphi_{l+1} - \varphi) - (n + n_{l-1})(\varphi - \varphi_{l-1})}{2h_x^2} = \\ &= \mu_x \frac{n(\varphi_{l+1} - 2\varphi + \varphi_{l-1}) - (n_{l+1} - 2n + n_{l-1})\varphi + (n_{l+1}\varphi_{l+1} - 2n\varphi + n_{l-1}\varphi_{l-1})}{2h_x^2} = \\ &= \mu_x \left(n'_x \varphi'_x - \frac{\tau}{2} (n''_{tx} \varphi'_x + n'_x \varphi''_{tx}) + n\varphi''_{xx} - \frac{\tau}{2} (n'_t \varphi''_{xx} + n\varphi'''_{txx}) \right) + O(\tau^2) + O(h_x^2),\end{aligned}\quad (2.1.27)$$

$$Z_{\bar{x}\bar{x}}(\hat{n}, \hat{\varphi}) = \mu_x \left(n'_x \hat{\varphi}'_x + \frac{\tau}{2} (n''_{tx} \hat{\varphi}'_x + n'_x \hat{\varphi}''_{tx}) + n\hat{\varphi}''_{xx} + \frac{\tau}{2} (n'_t \hat{\varphi}''_{xx} + n\hat{\varphi}'''_{txx}) \right) + O(\tau^2) + O(h_x^2),$$

$$Z_{\bar{x}\bar{x}}^{0.5}(n, \varphi) = \mu_x (n'_x \varphi'_x + n\varphi''_{xx}) + O(\tau^2) + O(h_x^2) = \mu_x (n\varphi'_x)'_x + O(\tau^2) + O(h_x^2).$$

Для уравнения относительно интенсивности (2.1.12):

$$\begin{aligned}I(x_l, y_j - h_y/2, t_m + \tau/2) &= I(x_l, y_j, t_m + \tau/2) - \frac{h_y}{2} I'_y(x_l, y_j, t_m + \tau/2) + \\ &+ \frac{h_y^2}{8} I''_{yy}(x_l, y_j, t_m + \tau/2) + O(h_y^3),\end{aligned}\quad (2.1.28)$$

$$\begin{aligned}I(x_l, y_j + h_y/2, t_m + \tau/2) &= I(x_l, y_j, t_m + \tau/2) + \frac{h_y}{2} I'_y(x_l, y_j, t_m + \tau/2) + \\ &+ \frac{h_y^2}{8} I''_{yy}(x_l, y_j, t_m + \tau/2) + O(h_y^3),\end{aligned}\quad (2.1.29)$$

$$I = \frac{\hat{I} + I}{2} = I(x_l, y_j, t_m + \tau/2) + O(h_y^2),$$

$$\frac{\hat{I} - I}{h_y} = I'_y(x_l, y_j, t_m + \tau/2) + O(h_y^2)$$

Для функций коэффициента поглощения, генерации и рекомбинации (2.1.5) разложение в ряд Тейлора приводит к следующим выражениям:

$$\begin{aligned}
\delta(n, N) &= (1 - N(x_l, y_j, t_m))e^{-\psi(1-\xi n(x_l, y_j, t_m))} = (1 - N(x_l, y_j, t_m + \tau/2))e^{-\psi(1-\xi n(x_l, y_j, t_m + \tau/2))} - \\
&- \frac{\tau}{2} \left((1 - N(x_l, y_j, t_m + \tau/2))\psi\xi n'_t - N'_t \right) e^{-\psi(1-\xi n(x_l, y_j, t_m + \tau/2))} + O(\tau^2), \\
\delta^{0.5} &= (1 - N(x_l, y_j, t_m + \tau/2))e^{-\psi(1-\xi n(x_l, y_j, t_m + \tau/2))} + O(\tau^2) \quad (2.1.30) \\
G &= q_0 I \delta^{0.5} = q_0 I (x_l, y_j, t_m + \tau/2) (1 - N(x_l, y_j, t_m + \tau/2)) e^{-\psi(1-\xi n(x_l, y_j, t_m + \tau/2))} + O(\tau^2) + O(h_y^2), \\
R &= \frac{nN + \hat{n}\hat{N} - n_0^2}{2\tau_R} = \frac{n(x_l, y_j, t_m + \tau/2)N(x_l, y_j, t_m + \tau/2) - n_0^2}{\tau_R} + O(\tau^2).
\end{aligned}$$

Таким образом, разностная схема (2.1.9) – (2.1.12) аппроксимирует исходную дифференциальную задачу (1.1.1) – (1.1.4) на достаточно гладком его решении со вторым порядком аппроксимации по времени и по пространственным координатам. *Конец доказательства.*

Теорема 2.1.2. Разностная схема (2.1.9) – (2.1.12) с неоднородными граничными условиями первого порядка аппроксимации по пространству (2.1.13) удовлетворяет закону сохранения заряда (2.1.16).

Доказательство. Для доказательства данной теоремы рассмотрим разностную производную инварианта (2.1.16) по времени и подставим соответствующие значения из уравнений (2.1.9) и (2.1.10):

$$\frac{\hat{Q} - Q}{\tau} = h_x h_y \sum_{l=1}^{P_x-1} \sum_{j=1}^{P_y-1} \left(\frac{\hat{n} - n}{\tau} - \frac{\hat{N} - N}{\tau} \right) = \frac{h_x h_y}{2} \sum_{l=1}^{P_x-1} \sum_{j=1}^{P_y-1} \left(\begin{aligned} &\kappa_x \left(n_{\bar{x}\bar{x}}^{0.5} - Z_{\bar{x}\bar{x}}(n, \varphi) \right) + \\ &+ \kappa_y \left(n_{\bar{y}\bar{y}}^{0.5} - Z_{\bar{y}\bar{y}}(n, \varphi) \right) \end{aligned} \right). \quad (2.1.31)$$

Отдельно просуммируем некоторые слагаемые, входящие в правую часть выражения (2.1.31):

$$\begin{aligned}
\sum_{l=1}^{P_x-1} n_{\bar{x}\bar{x}} &= \frac{1}{h_x^2} \sum_{l=1}^{P_x-1} (n_{l-1} - 2n + n_{l+1}) = \\
&= \frac{1}{h_x^2} \left(n_0 - \underline{\underline{2n_1}} + \underline{\underline{n_2}} + \underline{\underline{n_1}} - \underline{\underline{2n_2}} + n_3 + \underline{\underline{n_2}} - 2n_3 + n_4 + \dots + n_{N_x-2} - 2n_{P_x-1} + n_{P_x} \right) = \\
&= \frac{1}{h_x} (n_{\bar{x}, P_x j} - n_{x, 0 j}), \quad (2.1.32)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^{P_x-1} Z_{\bar{x}}(n, \varphi) &= \frac{\mu_x}{h_x} \sum_{l=1}^{P_x-1} (n_{l+0.5} \varphi_x - n_{l-0.5} \varphi_x) = \\
&= \frac{\mu_x}{2h_x^2} \left(\begin{aligned} &\left(\frac{(n_1 + n_2)(\varphi_2 - \varphi_1) - (n_0 + n_1)(\varphi_1 - \varphi_0) + (n_2 + n_3)(\varphi_3 - \varphi_2)}{-\frac{(n_1 + n_2)(\varphi_2 - \varphi_1) + \dots +}{+ (n_{P_x-1} + n_{P_x})(\varphi_{P_x} - \varphi_{P_x-1}) - (n_{P_x-2} + n_{P_x-1})(\varphi_{P_x-1} - \varphi_{P_x-2})} \right) \end{aligned} \right) = \\
&= \frac{\mu_x}{h_x} (n_{P_x-0.5} \varphi_{\bar{x}, P_x} - n_{0.5} \varphi_{x, 0}).
\end{aligned} \tag{2.1.33}$$

Подставим (2.1.32) и (2.3.33) в (2.1.31) и получим следующее равенство:

$$\begin{aligned}
\frac{\hat{Q} - Q}{\tau} &= \frac{h_y \kappa_x}{2} \sum_{j=1}^{P_x-1} \left(\begin{aligned} &\left(n_{\bar{x}, P_x j} - \mu_x n_{P_x-0.5 j} \varphi_{\bar{x}, P_x j} \right) - \left(n_{x, 0 j} - \mu_x n_{0.5 j} \varphi_{x, 0 j} \right) + \\ &+ \left(\hat{n}_{\bar{x}, P_x j} - \mu_x \hat{n}_{P_x-0.5 j} \hat{\varphi}_{\bar{x}, P_x j} \right) - \left(\hat{n}_{x, 0 j} - \mu_x \hat{n}_{0.5 j} \hat{\varphi}_{x, 0 j} \right) \end{aligned} \right) + \\
&+ \frac{h_x \kappa_y}{2} \sum_{l=1}^{P_y-1} \left(\begin{aligned} &\left(n_{\bar{y}, l P_y} - \mu_y n_{l P_y-0.5} \varphi_{\bar{y}, l P_y} \right) - \left(n_{y, l 0} - \mu_y n_{l 0.5} \varphi_{y, l 0} \right) + \\ &+ \left(\hat{n}_{\bar{y}, l P_y} - \mu_y \hat{n}_{l P_y-0.5} \hat{\varphi}_{\bar{y}, l P_y} \right) - \left(\hat{n}_{y, l 0} - \mu_y \hat{n}_{l 0.5} \hat{\varphi}_{y, l 0} \right) \end{aligned} \right).
\end{aligned} \tag{2.1.34}$$

С учетом граничных условий (2.1.13) правая часть (2.1.34) обращается в нуль. Следовательно, значение инварианта Q не изменяется на слоях по времени:

$$Q = \sum_{l=1}^{P_x-1} \sum_{j=1}^{P_y-1} h_x h_y (n - N) = \sum_{l=1}^{P_x-1} \sum_{j=1}^{P_y-1} h_x h_y (\hat{n} - \hat{N}) = 0. \tag{2.1.35}$$

Конец доказательства.

Следствие 2.1.1. Решение разностных уравнений (2.1.9) и (2.1.10) устойчиво в норме L_l .

Доказательство. Учитывая аппроксимацию начальных условий

$n_{kj}^0 = N_{kj}^0 = n_0$, $\varphi_{kj}^0 = 0$, $k = \overline{0, P_x}$, $j = \overline{0, P_y}$ равенство (2.1.35) записывается в виде:

$$\|\hat{n}\|_{L_l} = \|\hat{N}\|_{L_l} \tag{2.1.36}$$

где разностная норма L_l для положительной разностной функции определена как:

$$\|u\|_{L_l} = \sum_{j=1}^{P_y-1} \sum_{l=1}^{P_x-1} h_y h_x u_{lj}. \tag{2.1.37}$$

Используя те же рассуждения, что применялись для выражения (2.1.31) получается равенство:

$$\|\hat{n}\|_{L_l} + \|\mathbf{1} - \hat{N}\|_{L_l} = L_x L_y = const. \tag{2.1.38}$$

При записи (2.1.38) предполагается, что разностная функция \hat{N} не превосходит единицы (см. п.2.2.2). Заметим, что так как сумма норм двух функций ограничена константой, то решение разностных уравнений относительно концентраций свободных электронов и ионизированных доноров будет устойчиво в норме L_1 . *Конец доказательства.*

§2.2. Некоторые оценки разностного решения 2D задачи взаимодействия оптического импульса с полупроводником

Ниже представлены некоторые аналитические оценки для решения системы разностных уравнений (2.1.9) – (2.1.11), (2.1.19) с однородными граничными условиями (2.1.13).

При работе над параграфом использовались материалы из публикации автора [A12].

2.2.1. Положительность сеточной функции концентрации ионизированных доноров

Для начала, докажем положительность концентрации ионизированных доноров \hat{N} . Для этого перепишем разностное уравнение (2.1.9) в следующем виде:

$$\begin{aligned} \hat{N} \left[1 + 0.5\tau \left(q_0 |\hat{A}|^2 e^{-\psi + \xi\psi\hat{n}} + \frac{\hat{n}}{\tau_R} \right) \right] = N \left[1 - 0.5\tau \left(q_0 |A|^2 e^{-\psi + \xi\psi n} + \frac{n}{\tau_R} \right) \right] + \\ + \tau \left(0.5q_0 e^{-\psi} \left(|\hat{A}|^2 e^{\xi\psi\hat{n}} + |A|^2 e^{\xi\psi n} \right) + \frac{n_0^2}{\tau_R} \right). \end{aligned} \quad (2.2.1)$$

Предположим, что значения разностных функций n и N на предыдущем временном слое положительны. В этом случае правая часть уравнения (2.2.1) будет также положительна при выполнении следующих условий:

$$\tau \leq \frac{2}{q_0 |A|_{\max}^2 e^{-\psi + \psi\xi|n|_{\max}} + \frac{|n|_{\max}}{\tau_R}}, \quad |A|_{\max}^2 = \max_{l,j} (|A|^2), \quad (2.2.2)$$

Относительно левой части уравнения (2.2.1) важно заметить, что выражение в левых квадратных скобках будет положительно при любом знаке \hat{n} вследствие выбора разностного шага по времени. Действительно, если функция \hat{n} положительна, то это выражение, очевидно,

положительно. В случае отрицательности \hat{n} возможны две ситуации. В случае равенства нулю выражения $\left(q_0 | \hat{A} |^2 e^{-\psi + \xi \psi \hat{n}} + \frac{\hat{n}}{\tau_R} \right)$, значения \hat{N} будут положительны. В противном случае для достижения положительности концентрации ионизированных доноров на верхнем слое достаточно потребовать выполнения условий:

$$\tau \leq \frac{2\tau_R}{|\min \hat{n}|}, \quad \min \hat{n} = \min_{l,j} \hat{n}, \quad \text{если } \hat{n} < 0. \quad (2.2.3)$$

Таким образом, независимо от знака сеточной функции \hat{n} значения функции \hat{N} будут положительны, если выполнены условия (2.2.2) и (2.2.3). Эти условия являются достаточными.

Теорема 2.2.1. Если выполнены условия (2.2.2), (2.2.3) и значение концентрации ионизированных доноров положительно на предыдущем временном слое ($N > 0$), то на следующем временном слое ее значение так же положительно ($\hat{N} > 0$).

2.2.2. Ограниченность сеточной функции концентрации ионизированных доноров

Перепишем равенство (2.1.1) в следующем виде:

$$(1 - \hat{N}) \left[1 + 0.5\tau \left(q_0 | \hat{A} |^2 e^{-\psi + \xi \psi \hat{n}} + \frac{\hat{n}}{\tau_R} \right) \right] = (1 - N) \left[1 - 0.5\tau \left(q_0 | A |^2 e^{-\psi + \xi \psi n} + \frac{n}{\tau_R} \right) \right] + 0.5\tau \frac{\hat{n} + n - 2n_0^2}{\tau_R}. \quad (2.2.4)$$

Так как для функции N равновесное значение n_0 меньше единицы и в начальный момент времени $n = n_0$, неравенство $n > n_0^2$ справедливо для предыдущего временного слоя. Пусть сеточная функция, описывающая концентрацию ионизированных доноров на нижнем временном слое, меньше единицы: $N < 1$. Тогда, рассуждая аналогичным образом, как при доказательстве положительности \hat{N} в (2.2.1), можно показать, что $\hat{N} < 1$.

Замечание. Положительность сеточной функции \hat{n} может быть установлена с помощью подхода, используемого в [216, 217]. В этом случае потребуется провести преобразование сеточной концентрации свободных электронов \hat{n} .

Теорема 2.2.2. Если выполнены условия (2.2.2), (2.2.3) и значение концентрации ионизированных доноров ограничено единицей на предыдущем временном слое ($N < 1$), то на следующем временном слое ее значение так же ограничено единицей ($\hat{N} < 1$).

2.2.3. Оценка сеточной функции амплитуды оптического импульса в норме L_2

Введем скалярное произведение для разностной комплексной функции с нулевым значением в граничных узлах:

$$(u, v) = \sum_{l=1}^{P_x-1} \sum_{j=-P_y+1}^{P_y-1} h_x h_y u v^* = \sum_{j=-P_y+1}^{P_y-1} \sum_{l=1}^{P_x-1} h_y h_x u_l v_{lj}^*. \quad (2.2.5)$$

Тогда разностная норма L_2 будет определяться как:

$$\|u\|_{L_2}^2 = (u, u) = \sum_{l=1}^{P_x-1} \sum_{j=-P_y+1}^{P_y-1} h_x h_y u u^* = \sum_{l=1}^{P_x-1} \sum_{j=-P_y+1}^{P_y-1} h_x h_y |u|^2. \quad (2.2.6)$$

Умножим уравнение (2.1.19) на $A_{lj}^{0.5}$, а сопряженное уравнение – на $A_{lj}^{0.5}$. Просуммировав полученные уравнения и умножив их на пространственные шаги разностной сетки и просуммировав по её узлам, получим следующее уравнение:

$$\sum_{j=-P_y+1}^{P_y-1} \sum_{l=1}^{P_x-1} h_y h_x \left(\frac{|\hat{A}|^2 - |A|^2}{\tau} + \beta_A \bar{\delta}_0^{0.5} \delta^{0.5} |A|^2 \right) = 0, \quad (2.2.7)$$

из которого следует равенство:

$$\|\hat{A}\|_{L_2}^2 = \|A\|_{L_2}^2 - \tau \beta_A \bar{\delta}_0^{0.5} \sum_{j=-P_y+1}^{P_y-1} \sum_{l=1}^{P_x-1} h_y h_x \delta^{0.5} |A|^2. \quad (2.2.8)$$

Для записи выражения (2.2.7) использовались разностные формулы Грина для сеточных функций [106]:

$$(u_{xx}, v) = -(u_x, v_x) + u v_x \Big|_{P_x} - v u_x \Big|_0. \quad (2.2.9)$$

В силу постановки задачи (1.1.7) и т. 2.2.2 функция $\delta(n, N)$ ограничена снизу константой $\delta_{\min} = \min_{j,k} \delta(n, N, \hat{n}, \hat{N})$. Таким образом, из (2.2.8) следует неравенство:

$$\|\hat{A}\|_{L_2}^2 \left(1 + \frac{\tau}{2} \beta_A \bar{\delta}_0 \delta_{\min}\right) \leq \|A\|_{L_2}^2 \left(1 - \frac{\tau}{2} \beta_A \bar{\delta}_0 \delta_{\min}\right). \quad (2.2.10)$$

Таким образом норма L_2 комплексной функции A на текущем временном слое ограничена значением ее начального распределения:

$$\|\hat{A}\|_{L_2}^2 \leq q^m \|A_0\|_{L_2}^2 \leq \|A_0\|_{L_2}^2, \quad q = \left(1 - \frac{\tau}{2} \beta_A \bar{\delta}_0 \delta_{\min}\right) \left(1 + \frac{\tau}{2} \beta_A \bar{\delta}_0 \delta_{\min}\right)^{-1}, \quad (2.2.11)$$

если выполнено условие

$$\tau < \frac{2}{\beta_A \bar{\delta}_0 \delta_{\min}}. \quad (2.2.12)$$

Что означает устойчивость решения разностного уравнения Шредингера.

Теорема 2.2.3. Если выполнено условие (2.2.12), то L_2 -норма разностного решения уравнения (2.1.19) ограничена и это решение устойчиво в норме L_2 .

§2.3. Консервативная разностная схема для 3D задачи распространения оптического импульса в полупроводнике

При работе над параграфом использовались материалы из публикаций автора [A11, A13].

2.3.1. Разностная схема для 3D задачи распространения оптического импульса в полупроводнике

Для построения разностной схемы для решения системы уравнений (1.2.1) – (1.2.6) в области

$$G = \{0 \leq x \leq L_x\} \times \{0 \leq y \leq L_y\} \times \{0 \leq z \leq L_z\} \times \{0 \leq t \leq L_t\}$$

введем равномерные сетки $\Omega = \omega_x \times \omega_y \times \omega_z \times \omega_t$ и $\bar{\Omega}' = \omega_x \times \omega_y \times \omega'_z \times \bar{\omega}_t$:

$$\begin{aligned}
\omega_x &= \{x_l = lh_x, l = \overline{0, P_x}, h_x = L_x/P_x\}, \quad \omega_y = \{y_j = jh_y, j = \overline{0, P_y}, h_y = L_y/P_y\}, \\
\omega_z &= \{z_k = kh_z, k = \overline{0, P_z}, h_z = L_z/P_z\}, \quad \omega'_z = \{z'_k = (k-0.5)h_z, k = \overline{0, P_z+1}, h_z = L_z/P_z\}, \\
\omega_t &= \{t_m = m\tau, m = \overline{0, P_t}, \tau = L_t/P_t\}, \quad \bar{\omega}_t = \{\bar{t}_m = (m-0.5)\tau, m = \overline{1, P_t}, \tau = L_t/P_t\}.
\end{aligned} \tag{2.3.1}$$

Определим на Ω сеточные функции n_h, N_h, φ_h и на $\bar{\Omega}'$ сеточную функцию I_h следующим образом:

$$n_{ijk}^m = n(x_i, y_j, z_k, t_m), \quad N_{ijk}^m = N(x_i, y_j, z_k, t_m), \quad \varphi_{ijk}^m = \varphi(x_i, y_j, z_k, t_m), \quad I_{ijk}^m = I(x_i, y_j, z'_k, \bar{t}_m).$$

Для записи разностных уравнений дополним введенные в (2.1.3) безиндексные обозначения:

$$\begin{aligned}
f_{k\pm 1} &= f_{ijk\pm 1}^m, \quad f_{k\pm 0.5} = (f_k + f_{k\pm 1})/2, \\
f_z &= \frac{f_{k+1} - f_k}{h_z}, \quad f_{\bar{z}} = \frac{f_k - f_{k-1}}{h_z}, \quad f_{\bar{z}\bar{z}} = \frac{f_{k+1} - 2f_k + f_{k-1}}{h_z^2}, \\
\Lambda \varphi &= \varphi_{\bar{x}\bar{x}}^{0.5} + \varphi_{\bar{y}\bar{y}}^{0.5} + \varphi_{\bar{z}\bar{z}}^{0.5}, \\
I^m &= I_{ijk}^m, \quad \hat{I}^m = I_{ijk+1}^m, \quad I = 0.5(I_{ijk}^{m+1} + I_{ijk+1}^{m+1}),
\end{aligned} \tag{2.3.2}$$

где f – одна из следующих функций: n, N, φ .

Сеточные функции G_h, R_h, δ_h и $\hat{G}_h, \hat{R}_h, \hat{\delta}_h$ определяются аналогично (2.1.5).

Так же к разностным операторам (2.1.8) добавим аналогичный для оси z:

$$Z_{\bar{z}\bar{z}}(n, \varphi) = \frac{\mu_z}{h_z} (n_{k+0.5} \varphi_z - n_{k-0.5} \varphi_{\bar{z}}), \quad Z_{\bar{z}\bar{z}}(n, \varphi) = (Z_{\bar{z}\bar{z}}(\hat{n}, \hat{\varphi}) + Z_{\bar{z}\bar{z}}(n, \varphi))/2. \tag{2.3.3}$$

С учетом введенных обозначений, для системы (1.2.1) – (1.2.4) строится неявная симметричная разностная схема (схема Кранка-Николсона):

$$\frac{\hat{N} - N}{\tau} = G - R, \quad l = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{0, P_y}, \quad k = \overline{0, P_z}, \tag{2.3.4}$$

$$\frac{\hat{n} - n}{\tau} = \kappa_x \left(n_{\bar{x}\bar{x}}^{0.5} - Z_{\bar{x}\bar{x}}(n, \varphi) \right) + \kappa_y \left(n_{\bar{y}\bar{y}}^{0.5} - Z_{\bar{y}\bar{y}}(n, \varphi) \right) + \kappa_z \left(n_{\bar{z}\bar{z}}^{0.5} - Z_{\bar{z}\bar{z}}(n, \varphi) \right) + G - R, \tag{2.3.5}$$

$$l = \overline{1, P_x - 1}, \quad j = \overline{1, P_y - 1}, \quad k = \overline{1, P_z - 1},$$

$$\Lambda \varphi = \gamma(n - N), \quad l = \overline{1, P_x - 1}, \quad j = \overline{1, P_y - 1}, \quad k = \overline{1, P_z - 1}, \tag{2.3.6}$$

$$\frac{\hat{I}^{m+1} - I^{m+1}}{h_z} + \delta_0 \delta^{0.5} I = 0, \quad l = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{0, P_y}, \quad k = \overline{0, P_z}. \quad (2.3.7)$$

Граничные условия (1.2.5) – (1.2.6) аппроксимируются с 1 порядком по пространству и 2 по времени:

$$\begin{aligned} \hat{\phi}_{x,0jk} &= \hat{\phi}_{\bar{x},P_xjk} = -E_x, \quad \hat{n}_{x,0jk} + \mu_x \hat{n}_{0.5jk} E_x = \hat{n}_{\bar{x},P_xjk} + \mu_x \hat{n}_{P_x-0.5jk} E_x = 0, \quad j = \overline{0, P_y}, \quad k = \overline{0, P_z}, \\ \hat{\phi}_{y,l0k} &= \hat{\phi}_{\bar{y},lP_yk} = -E_y, \quad \hat{n}_{y,l0k} + \mu_y \hat{n}_{l0.5k} E_y = \hat{n}_{\bar{y},lP_yk} + \mu_y \hat{n}_{lP_y-0.5k} E_y = 0, \quad l = \overline{0, P_x}, \quad k = \overline{0, P_z}, \\ \hat{\phi}_{z,lj0} &= \hat{\phi}_{\bar{z},ljP_z} = -E_z, \quad \hat{n}_{z,lj0} + \mu_z \hat{n}_{lj0.5} E_z = \hat{n}_{\bar{z},ljP_z} + \mu_z \hat{n}_{ljP_z-0.5} E_z = 0, \quad l = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{0, P_y}. \end{aligned} \quad (2.3.8)$$

Интенсивность падающего оптического импульса I (1.2.7) задается следующим образом:

$$I_{lj0}^{m+1} = e^{-\frac{(x_l - 0.5L_x)^2}{a_x^2}} e^{-\frac{(y_j - 0.5L_y)^2}{a_y^2}} (1 - e^{-10\tau_{m+1}}), \quad l = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{0, P_y}, \quad m \geq 0. \quad (2.3.9)$$

В начальный момент времени оптическое излучение отсутствует:

$$I_{ljk}^0 = 0, \quad l = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{0, P_y}, \quad k = \overline{0, P_z + 1}. \quad (2.3.10)$$

Консервативность разностной схемы заключается в выполнении разностного аналога закона сохранения заряда (1.2.8) во внутренних узлах сетки Ω :

$$Q = \sum_{l=1}^{P_x-1} \sum_{j=1}^{P_y-1} \sum_{k=1}^{P_z-1} h_x h_y h_z (n_{ljk} - N_{ljk}) = 0. \quad (2.3.11)$$

2.3.2. Исследование порядка аппроксимации и консервативности 3D разностной схемы

Теорема 2.3.1. Разностная схема (2.3.4) – (2.3.7) аппроксимирует дифференциальную задачу (1.2.1) – (1.2.4) со 2 порядком по времени и пространству относительно точки $(x_l, y_j, z_k, t_m + \tau/2)$.

Теорема 2.3.2. Разностная схема (2.3.4) – (2.3.7) с граничными условиями первого порядка аппроксимации по пространству (2.3.8) удовлетворяет закону сохранения заряда (2.3.11).

Доказательство теорем 2.3.1 и 2.3.2 аналогично теоремам 2.1.1 и 2.1.2 и отличается только добавлением 3-й координаты.

§2.4. Методы реализации разностных схем для рассмотренных 2D задач

Наиболее распространенным подходом для решения задач подобных (1.1.1) – (1.1.6) являются методы расщепления [117-122, 130-137]. Однако, данные методы обладают рядом недостатков. К примеру, могут приводить к нарушению свойства консервативности или отсутствию асимптотической устойчивости.

В случае использования какого-либо из методов расщепления, в разностную сетку вводятся промежуточные временные слои, на которых ищется решение уравнения перед тем, как перейти к вычислениям на верхнем слое. В данном подходе значение на каждом из слоев вычисляется только один раз и точность полученного результата зависит только от выбранного шага по времени и количества дополнительных слоев по времени. Основное отличие итерационного процесса от методов расщепления заключается в отсутствии промежуточных временных слоев (рис. 2.4.1). В диссертации для рассматриваемой задачи предложен оригинальный многоэтапный итерационный процесс, реализующий нелинейную консервативную разностную схему. Его основной особенностью является то, что на каждом этапе итерационного процесса в схеме присутствуют значения и с верхних, и нижних слоев. Таким образом при использовании итерационного метода решение задачи происходит на верхнем временном слое с использованием значений, полученных на нижнем слое и предыдущих итерациях. При работе над параграфом использовались материалы из публикаций автора [Аб, А9, А10, А12, А15].

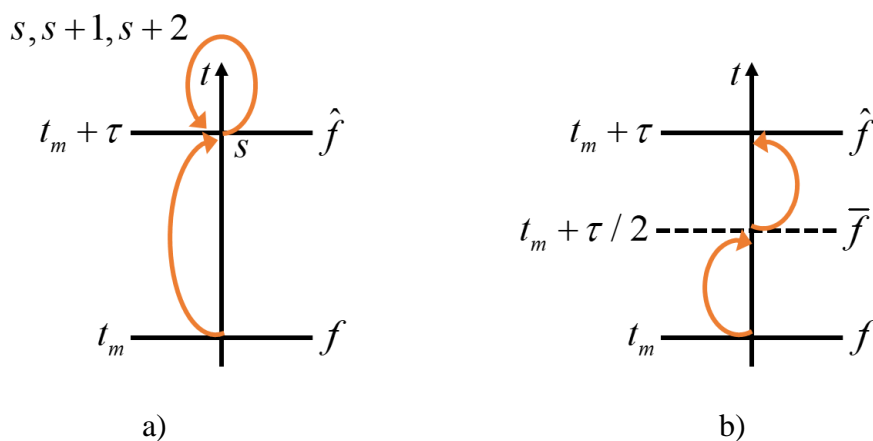


Рис. 2.4.1. Схема вычислений при использовании трехэтапного итерационного процесса (a) и метода расщепления в 2D случае (b). f - сеточная функция на нижнем временном слое; \hat{f} , \bar{f} - ее значения на верхнем и промежуточном временных слоях соответственно.

2.4.1. Двухэтапный итерационный процесс, реализующий консервативную разностную схему для 2D нестационарных задач

Для записи двухэтапного итерационного процесса (ДЭИП) используются следующие обозначения:

$$\begin{aligned}
 \overset{s}{f} &= (\overset{s}{\hat{f}} + \overset{s}{f}) / 2, \quad \overset{s+1}{f} = (\overset{s+1}{\hat{f}} + \overset{s+1}{f}) / 2, \\
 \overset{s+1}{G} &= G(\overset{s+1}{\hat{n}}, \overset{s+1}{\hat{N}}, \overset{s+1}{\hat{\phi}}, I), \quad \overset{s}{G} = G(\overset{s}{n}, \overset{s}{N}, \overset{s}{\phi}, I), \quad \overset{s+1}{R} = R(\overset{s+1}{\hat{n}}, \overset{s+1}{\hat{N}}), \quad \overset{s}{\delta} = \delta(\overset{s}{\hat{n}}, \overset{s}{\hat{N}}, \overset{s}{\hat{\phi}}), \\
 \overset{s+1}{G} &= (\overset{s+1}{\hat{G}} + \overset{s+1}{G}) / 2, \quad \overset{s+1}{R} = (\overset{s+1}{\hat{R}} + \overset{s+1}{R}) / 2, \quad \overset{s}{\delta} = (\overset{s}{\hat{\delta}} + \overset{s}{\delta}) / 2, \\
 \overset{s}{Z_{\bar{x}\bar{x}}}(n, \phi) &= (Z_{\bar{x}\bar{x}}(\overset{s}{\hat{n}}, \overset{s}{\hat{\phi}}) + Z_{\bar{x}\bar{x}}(n, \phi)) / 2, \quad \overset{s}{Z_{\bar{y}\bar{y}}}(n, \phi) = (Z_{\bar{y}\bar{y}}(\overset{s}{\hat{n}}, \overset{s}{\hat{\phi}}) + Z_{\bar{y}\bar{y}}(n, \phi)) / 2,
 \end{aligned} \tag{2.4.1}$$

где f – значения одной из функций n , N , ϕ , I на нижнем временном слое, $\overset{s}{\hat{f}}$, $\overset{s+1}{\hat{f}}$ – их значения на s -ой и $s+1$ -ой итерациях соответственно.

Согласно введенным обозначениям, первый этап итерационного процесса записывается как:

$$\frac{\overset{s+1}{\hat{N}} - \overset{s+1}{N}}{\tau} = \overset{s+1}{G} - \overset{s+1}{R}, \quad l = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{0, P_y}, \tag{2.4.2}$$

$$\frac{\overset{s+1}{\hat{n}} - \overset{s+1}{n}}{\tau} = \kappa_x \left(n_{\bar{x}\bar{x}} - Z_{\bar{x}\bar{x}}(n, \phi) \right) + \kappa_y \left(n_{\bar{y}\bar{y}} - Z_{\bar{y}\bar{y}}(n, \phi) \right) + \overset{s+1}{G} - \overset{s+1}{R}, \quad l = \overline{1, P_x - 1}, \quad j = \overline{1, P_y - 1}, \tag{2.4.3}$$

$$\Lambda \overset{s+1}{\hat{\phi}} = \gamma(\overset{s+1}{\hat{n}} - \overset{s+1}{N}), \quad l = \overline{1, P_x - 1}, \quad j = \overline{1, P_y - 1}, \tag{2.4.4}$$

$$\frac{\overset{s+1}{\hat{I}^{m+1}} - \overset{s+1}{I^{m+1}}}{h_y} + \delta_0 \overset{s+1}{\delta} \overset{s+1}{I^{m+1}} = 0, \quad l = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{1, P_y}, \tag{2.4.5}$$

с граничными условиями:

$$\begin{aligned}
 \overset{s+1}{\hat{\phi}}_{x,0j} &= \overset{s+1}{\hat{\phi}}_{\bar{x},P_xj} = -E_x, \quad \overset{s+1}{\hat{n}}_{x,0j} + \mu_x \overset{s}{\hat{n}}_{0.5j} E_x = \overset{s+1}{\hat{n}}_{\bar{x},P_xj} + \mu_x \overset{s}{\hat{n}}_{P_x-0.5j} E_x = 0, \quad j = \overline{0, P_y}, \\
 \overset{s+1}{\hat{\phi}}_{y,l0} &= \overset{s+1}{\hat{\phi}}_{\bar{y},lP_y} = -E_y, \quad \overset{s+1}{\hat{n}}_{y,l0} + \mu_y \overset{s}{\hat{n}}_{l0.5} E_y = \overset{s+1}{\hat{n}}_{\bar{y},lP_y} + \mu_y \overset{s}{\hat{n}}_{lP_y-0.5} E_y = 0, \quad l = \overline{0, P_x},
 \end{aligned} \tag{2.4.6}$$

$$I_{l0}^{s+1} = e^{-\frac{(x_l - 0.5L_x)^2}{a_x^2}} \left(1 - e^{-10\bar{l}_{m+1}}\right), \quad l = \overline{0, P_x}.$$

Второй этап итерационного процесса выглядит следующим образом:

$$\frac{\hat{N} - N}{\tau} = G - R, \quad l = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{0, P_y}, \quad (2.4.7)$$

$$\frac{\hat{n} - n}{\tau} = \kappa_x \left(n_{\bar{x}\bar{x}} - Z_{\bar{x}\bar{x}}(n, \varphi) \right) + \kappa_y \left(n_{\bar{y}\bar{y}} - Z_{\bar{y}\bar{y}}(n, \varphi) \right) + G - R, \quad l = \overline{1, P_x - 1}, \quad j = \overline{1, P_y - 1}, \quad (2.4.8)$$

$$\Lambda \hat{\varphi} = \gamma(\hat{n} - \hat{N}), \quad l = \overline{1, P_x - 1}, \quad j = \overline{1, P_y - 1}, \quad (2.4.9)$$

$$\frac{\hat{I}^{m+1} - I^{m+1}}{h_y} + \delta_0 \delta I^{m+1} = 0, \quad l = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{1, P_y}, \quad (2.4.10)$$

с граничными условиями:

$$\begin{aligned} \hat{\varphi}_{x,0j} &= \hat{\varphi}_{\bar{x}, P_x j} = -E_x, \quad \hat{n}_{x,0j} + \mu_x \hat{n}_{0.5j} E_x = \hat{n}_{\bar{x}, P_x j} + \mu_x \hat{n}_{P_x - 0.5j} E_x = 0, \quad j = \overline{0, P_y}, \\ \hat{\varphi}_{y,l0} &= \hat{\varphi}_{\bar{y}, l P_y} = -E_y, \quad \hat{n}_{y,l0} + \mu_y \hat{n}_{l0.5} E_y = \hat{n}_{\bar{y}, l P_y} + \mu_y \hat{n}_{l P_y - 0.5} E_y = 0, \quad l = \overline{0, P_x}, \end{aligned} \quad (2.4.11)$$

$$I_{l0}^{s+2} = e^{-\frac{(x_l - 0.5L_x)^2}{a_x^2}} \left(1 - e^{-10\bar{l}_{m+1}}\right), \quad l = \overline{0, P_x}.$$

Итерационный процесс повторяется до тех пор, пока не будут выполнены следующие условия:

$$\begin{aligned} |\hat{n} - \hat{n}| < |\hat{n}| \varepsilon_1 + \varepsilon_2, \quad |\hat{N} - \hat{N}| < |\hat{N}| \varepsilon_1 + \varepsilon_2, \quad |\hat{\varphi} - \hat{\varphi}| < |\hat{\varphi}| \varepsilon_1 + \varepsilon_2, \\ |\hat{I}^{m+1} - \hat{I}^{m+1}| < |\hat{I}^{m+1}| \varepsilon_1 + \varepsilon_2, \quad l = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{0, P_y}. \end{aligned} \quad (2.4.12)$$

Если критерий (2.4.12) выполнен, то происходит переход на следующий временной слой.

В качестве начального приближения для итерационного процесса используются значения функций на предыдущем временном слое:

$$\hat{n}^0 = n, \quad \hat{N}^0 = N, \quad \hat{\varphi}^0 = \varphi, \quad \hat{I}^{m+1,0} = \hat{I}^m, \quad l = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{0, P_y}. \quad (2.4.13)$$

В уравнениях (2.4.2) – (2.4.5) и (2.4.7) – (2.4.10) функции \hat{N}^{s+1} , \hat{I}^{s+1} , \hat{N}^{s+2} , \hat{I}^{s+2} вычисляются явно, а \hat{n}^{s+1} , \hat{n}^{s+2} – методом прогонки. Для нахождения $\hat{\phi}^{s+1}$, $\hat{\phi}^{s+2}$ используется либо прямой метод, либо строится дополнительный итерационный процесс.

В случае использования модели с учетом дифракционных эффектов (1.1.12), итерационный процесс для разностного уравнения (2.1.19) записывается следующим образом:

$$\frac{\hat{A}^{s+1} - A}{\tau} + iD_{A_x} A_{xx}^{s+1} + iD_{A_y} A_{yy}^s + \frac{\beta_A \bar{\delta}_0}{2} \delta A^{s, s} = 0, \quad l = \overline{1, P_x - 1}, \quad j = \overline{-P_y + 1, P_y - 1}, \quad (2.4.14)$$

на первом этапе итерационного процесса и

$$\frac{\hat{A}^{s+2} - A}{\tau} + iD_{A_x} A_{xx}^{s+1} + iD_{A_y} A_{yy}^{s+2} + \frac{\beta_A \bar{\delta}_0}{2} \delta A^{s+1, s+1} = 0, \quad l = \overline{1, P_x - 1}, \quad j = \overline{-P_y + 1, P_y - 1}, \quad (2.4.15)$$

на втором. При этом

$$\hat{G} = G(\hat{n}, \hat{N}, \hat{\phi}, |\hat{A}|^2), \quad G = G(n, N, \phi, |A|^2). \quad (2.4.16)$$

Граничные условия для функций \hat{n}^{s+1} , $\hat{\phi}^{s+1}$, \hat{A}^{s+1} записываются для случая отсутствия внешнего электрического поля:

$$\begin{aligned} \hat{\phi}_{x,0j}^{s+1} = \hat{\phi}_{\bar{x},P_x j}^{s+1} = 0, \quad \hat{n}_{x,0j}^{s+1} = \hat{n}_{\bar{x},P_x j}^{s+1} = 0, \quad j = \overline{0, P_y}, \quad \hat{A}_{0j}^{s+1} = \hat{A}_{P_x j}^{s+1} = 0, \quad j = \overline{-P_y, P_y}, \\ \hat{\phi}_{y,l0}^{s+1} = \hat{\phi}_{\bar{y},lP_y}^{s+1} = 0, \quad \hat{n}_{y,l0}^{s+1} = \hat{n}_{\bar{y},lP_y}^{s+1} = 0, \quad \hat{A}_{l,-P_y}^{s+1} = \hat{A}_{lP_y}^{s+1} = 0, \quad l = \overline{0, P_x}. \end{aligned} \quad (2.4.17)$$

Уравнения (2.4.14) и (2.4.15) решаются с помощью прогонки.. Итерационный процесс повторяется до тех пор, пока не будут выполнены следующие условия:

$$\begin{aligned} |\hat{n}^{s+2} - \hat{n}^s| < |\hat{n}^s| \varepsilon_1 + \varepsilon_2, \quad |\hat{N}^{s+2} - \hat{N}^s| < |\hat{N}^s| \varepsilon_1 + \varepsilon_2, \quad |\hat{\phi}^{s+2} - \hat{\phi}^s| < |\hat{\phi}^s| \varepsilon_1 + \varepsilon_2, \quad l = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{0, P_y}, \\ |\hat{A}^{s+2} - \hat{A}^s| < |\hat{A}^s| \varepsilon_1 + \varepsilon_2, \quad l = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{-P_y, P_y}. \end{aligned} \quad (2.4.18)$$

При их выполнении происходит переход на следующий временной слой. В качестве начально приближения используются значения с предыдущего временного слоя:

$$\hat{n}^0 = n, \quad \hat{N}^0 = N, \quad \hat{\phi}^0 = \phi, \quad l = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{0, P_y}, \quad \hat{A}^0 = A, \quad l = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{-P_y, P_y}. \quad (2.4.19)$$

2.4.2 Исследование консервативности на итерациях для 2D разностной схемы

Теорема 2.4.1. Двухэтапный итерационный процесс (2.4.2) – (2.4.11) с граничными условия первого порядка аппроксимации удовлетворяет закону сохранения заряда (2.1.16) на итерациях ($\hat{Q}^{s+2} = \hat{Q}^s$).

Доказательство. Рассмотрим зависимость инварианта (2.1.16) от времени и просуммируем слагаемые, входящие в правую часть по формулам (2.1.30).

Таким образом для первого этапа итерационного процесса (2.4.2) – (2.4.5) выражение примет следующий вид:

$$\begin{aligned} \frac{\hat{Q}^{s+1} - \hat{Q}^s}{\tau} = & \frac{h_y \kappa_x}{2} \sum_{j=1}^{P_x-1} \left(\left(n_{\bar{x}, P_x j} - \mu_x n_{P_x-0.5j} \varphi_{\bar{x}, P_x j} \right) - \left(n_{x, 0j} - \mu_x n_{0.5j} \varphi_{x, 0j} \right) + \right. \\ & \left. + \left(\hat{n}_{\bar{x}, P_x j} - \mu_x \hat{n}_{P_x-0.5j} \hat{\varphi}_{\bar{x}, P_x j} \right) - \left(\hat{n}_{x, 0j} - \mu_x \hat{n}_{0.5j} \hat{\varphi}_{x, 0j} \right) \right) + \\ & + \frac{h_x \kappa_y}{2} \sum_{l=1}^{P_y-1} \left(\left(n_{\bar{y}, l P_y} - \mu_y n_{l P_y-0.5} \varphi_{\bar{y}, l P_y} \right) - \left(n_{y, l 0} - \mu_y n_{l 0.5} \varphi_{y, l 0} \right) + \right. \\ & \left. + \left(\hat{n}_{\bar{y}, l P_y} - \mu_y \hat{n}_{l P_y-0.5} \hat{\varphi}_{\bar{y}, l P_y} \right) - \left(\hat{n}_{y, l 0} - \mu_y \hat{n}_{l 0.5} \hat{\varphi}_{y, l 0} \right) \right). \end{aligned} \quad (2.4.20)$$

И для второго (2.4.7) – (2.4.10):

$$\begin{aligned} \frac{\hat{Q}^{s+2} - \hat{Q}^s}{\tau} = & \frac{h_y \kappa_x}{2} \sum_{j=1}^{P_x-1} \left(\left(n_{\bar{x}, P_x j} - \mu_x n_{P_x-0.5j} \varphi_{\bar{x}, P_x j} \right) - \left(n_{x, 0j} - \mu_x n_{0.5j} \varphi_{x, 0j} \right) + \right. \\ & \left. + \left(\hat{n}_{\bar{x}, P_x j} - \mu_x \hat{n}_{P_x-0.5j} \hat{\varphi}_{\bar{x}, P_x j} \right) - \left(\hat{n}_{x, 0j} - \mu_x \hat{n}_{0.5j} \hat{\varphi}_{x, 0j} \right) \right) + \\ & + \frac{h_x \kappa_y}{2} \sum_{l=1}^{P_y-1} \left(\left(n_{\bar{y}, l P_y} - \mu_y n_{l P_y-0.5} \varphi_{\bar{y}, l P_y} \right) - \left(n_{y, l 0} - \mu_y n_{l 0.5} \varphi_{y, l 0} \right) + \right. \\ & \left. + \left(\hat{n}_{\bar{y}, l P_y} - \mu_y \hat{n}_{l P_y-0.5} \hat{\varphi}_{\bar{y}, l P_y} \right) - \left(\hat{n}_{y, l 0} - \mu_y \hat{n}_{l 0.5} \hat{\varphi}_{y, l 0} \right) \right). \end{aligned} \quad (2.4.21)$$

Из граничного условия (2.4.11) следует, что:

$$n_{x, 0j} + \mu_x n_{0.5j} E_x = n_{\bar{x}, P_x j} + \mu_x n_{P_x-0.5j} E_x = 0, \quad j = \overline{0, P_y}. \quad (2.4.22)$$

Таким образом, с учетом граничных условий (2.4.6), (2.4.11) и (2.4.22), равенства (2.4.20) и (2.4.21) записываются в следующем виде:

$$\frac{\hat{Q}^{s+1} - Q}{\tau} = \frac{h_x \kappa_y}{2} \sum_{l=1}^{P_x-1} \left(\left(n_{\bar{y},lP_y} + \mu_y n_{lP_y-0.5} E_y \right) - \left(n_{y,l0} + \mu_y n_{l0.5} E_y \right) + \right. \\ \left. + \left(\hat{n}_{\bar{y},lP_y} + \mu_y \hat{n}_{lP_y-0.5} E_y \right) - \left(\hat{n}_{y,l0} + \mu_y \hat{n}_{l0.5} E_y \right) \right), \quad (2.4.23)$$

$$\frac{\hat{Q}^{s+2} - Q}{\tau} = \frac{h_x \kappa_y}{2} \sum_{l=1}^{P_x-1} \left(\left(n_{\bar{y},lP_y} + \mu_y n_{lP_y-0.5} E_y \right) - \left(n_{y,l0} + \mu_y n_{l0.5} E_y \right) \right). \quad (2.4.24)$$

Так как число итерций для двухэтапного итерационного процесса всегда кратно 2, то из (2.4.24) следует:

$$\frac{\hat{Q}^s - Q}{\tau} = \frac{h_x \kappa_y}{2} \sum_{l=1}^{P_x-1} \left(\left(n_{\bar{y},lP_y} + \mu_y n_{lP_y-0.5} E_y \right) - \left(n_{y,l0} + \mu_y n_{l0.5} E_y \right) \right). \quad (2.4.24)$$

Если вычесть между собой (2.4.22), (2.4.23) и (2.4.24), то получатся следующие соотношения:

$$\frac{\hat{Q}^{s+1} - \hat{Q}^s}{\tau} = \frac{h_x \kappa_y}{2} \sum_{l=1}^{P_x-1} \left(\left(\hat{n}_{\bar{y},lP_y} + \mu_y \hat{n}_{lP_y-0.5} E_y \right) - \left(\hat{n}_{y,l0} + \mu_y \hat{n}_{l0.5} E_y \right) \right), \quad (2.4.25)$$

$$\frac{\hat{Q}^{s+2} - \hat{Q}^{s+1}}{\tau} = -\frac{h_x \kappa_y}{2} \sum_{l=1}^{P_x-1} \left(\left(\hat{n}_{\bar{y},lP_y} + \mu_y \hat{n}_{lP_y-0.5} E_y \right) - \left(\hat{n}_{y,l0} + \mu_y \hat{n}_{l0.5} E_y \right) \right), \quad (2.4.26)$$

$$\frac{\hat{Q}^{s+2} - \hat{Q}^s}{\tau} = 0. \quad (2.4.27)$$

Из (2.4.25) – (2.4.27) следует, что изменения инварианта, возникающие после первого этапа двухэтапного итерационного процесса (2.4.25) полностью компенсируются на втором этапе (2.4.26). В результате чего после выполнения обоих этапов двухэтапного итерационного процесса итоговое изменение инварианта равно нулю (2.4.27) и, следовательно, схема (2.4.2) – (2.4.11) консервативна на итерациях. *Конец доказательства.*

2.4.3. Метод расщепления для 2D задачи взаимодействия оптического импульса с полупроводником

Для исследования эффективности многоэтапного итерационного процесса для решения рассматриваемой задачи проведено сравнение с использованием известных в литературе методов расщепления.

Для численного решения 2D задачи взаимодействия оптического импульса с полупроводником (1.1.1) – (1.1.6) в диссертации используется широко применяемый для линейных задач метод переменных направлений (продольно-поперечная прогонка), модифицированный для случая нелинейной задачи. В дальнейшем в диссертации этот метод будем называть методом расщепления (MP).

В области G вводится, в дополнение к сеткам (2.1.1), равномерная сетка $\bar{\Omega} = \omega_x \times \omega_y \times \bar{\omega}_t$, на ней определяются сеточные функции $\bar{n}_h, \bar{N}_h, \bar{\varphi}_h$ следующим образом:

$$\bar{n}_{ij}^m = n(x_i, y_j, \bar{t}_m), \quad \bar{N}_{ij}^m = N(x_i, y_j, \bar{t}_m), \quad \bar{\varphi}_{ij}^m = \varphi(x_i, y_j, \bar{t}_m). \quad (2.4.28)$$

Для упрощения записи разностных уравнений будем использовать безиндексные обозначения (2.1.2).

Сеточные функции $G, R, \delta, \bar{G}, \bar{R}, \bar{\delta}$ определяются следующим образом:

$$\begin{aligned} G_h &= G\left(n, N, \varphi, I^{0.5}\right), \quad R_h = R(n, N), \quad \delta_h = \delta(n, N, \varphi), \\ \bar{G}_h &= G\left(\bar{n}, \bar{N}, \bar{\varphi}, I^{0.5}\right), \quad \bar{R}_h = R(\bar{n}, \bar{N}), \quad \bar{\delta}_h = \delta(\bar{n}, \bar{N}, \bar{\varphi}). \end{aligned} \quad (2.4.29)$$

При использовании метода расщепления, сначала необходимо решить систему на промежуточном временном слое:

$$\begin{aligned} \frac{\bar{N} - N}{0.5\tau} &= G - R, \quad l = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{0, P_y}, \\ \frac{\bar{n} - n}{0.5\tau} &= \kappa_x (\bar{n}_{xx} - Z_{xx}(n, \varphi)) + \kappa_y (n_{yy} - Z_{yy}(n, \varphi)) + G - R, \quad l = \overline{1, P_x - 1}, \quad j = \overline{1, P_y - 1}, \\ \Lambda \bar{\varphi} &= \gamma(\bar{n} - \bar{N}), \quad l = \overline{1, P_x - 1}, \quad j = \overline{1, P_y - 1}, \\ \frac{\hat{I}^{m+1} - I^{m+1}}{h_y} + \delta_0 \bar{\delta} I &= 0, \quad l = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{1, P_y}. \end{aligned} \quad (2.4.30)$$

Граничные условия (1.1.5) – (1.1.6) при этом примут следующий вид:

$$\begin{aligned}\bar{\varphi}_{x,0j} &= \bar{\varphi}_{\bar{x},P_xj} = -E_x, \quad \bar{n}_{x,0j} + \mu_x n_{0.5j} E_x = \bar{n}_{\bar{x},P_xj} + \mu_x n_{P_x-0.5j} E_x = 0, \quad j = \overline{0, P_y}, \\ \bar{\varphi}_{y,l0} &= \bar{\varphi}_{\bar{y},lP_y} = -E_y, \quad \bar{n}_{y,l0} + \mu_y \bar{n}_{l0.5} E_y = \bar{n}_{\bar{y},lP_y} + \mu_y \bar{n}_{lP_y-0.5} E_y = 0, \quad l = \overline{0, P_x}, \\ I_{l0}^{m+1} &= e^{-\frac{(x_l - 0.5L_x)^2}{a_x^2}} \left(1 - e^{-10\bar{t}_{m+1}}\right), \quad l = \overline{0, P_x}.\end{aligned}\tag{2.4.31}$$

Затем, используя полученные значения на промежуточном слое, находятся значения функций на верхнем временном слое \hat{n} , \hat{N} , $\hat{\varphi}$:

$$\begin{aligned}\frac{\hat{N} - \bar{N}}{0.5\tau} &= \bar{G} - \bar{R}, \quad l = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{0, P_y}, \\ \frac{\hat{n} - \bar{n}}{0.5\tau} &= \kappa_x (\bar{n}_{\bar{x}\bar{x}} - Z_{\bar{x}\bar{x}}(\bar{n}, \bar{\varphi})) + \kappa_y (\hat{n}_{\bar{y}\bar{y}} - Z_{\bar{y}\bar{y}}(\bar{n}, \bar{\varphi})) + \bar{G} - \bar{R}, \quad l = \overline{1, P_x - 1}, \quad j = \overline{1, P_y - 1}, \\ \Lambda \hat{\varphi} &= \gamma(\hat{n} - \hat{N}), \quad l = \overline{1, P_x - 1}, \quad j = \overline{1, P_y - 1},\end{aligned}\tag{2.4.32}$$

Граничные условия аппроксимируются следующим образом:

$$\begin{aligned}\hat{\varphi}_{x,0j} &= \hat{\varphi}_{\bar{x},P_xj} = -E_x, \quad \hat{n}_{x,0j} + \mu_x \hat{n}_{0.5j} E_x = \hat{n}_{\bar{x},P_xj} + \mu_x \hat{n}_{P_x-0.5j} E_x = 0, \quad j = \overline{0, P_y}, \\ \hat{\varphi}_{y,l0} &= \hat{\varphi}_{\bar{y},lP_y} = -E_y, \quad \hat{n}_{y,l0} + \mu_y \bar{n}_{l0.5} E_y = \hat{n}_{\bar{y},lP_y} + \mu_y \bar{n}_{lP_y-0.5} E_y = 0, \quad l = \overline{0, P_x}.\end{aligned}\tag{2.4.33}$$

Из-за отсутствия нелинейных слагаемых схема (2.4.30) – (2.4.33) имеет только первый порядок аппроксимации по времени.

2.4.4. Модифицированный метод расщепления для 2D задачи взаимодействия оптического импульса с полупроводником

Как говорилось выше, из-за нелинейной части схема (2.4.30) – (2.4.33) аппроксимирует задачу (1.1.1) – (1.1.6) только с первым порядком по времени. Изменим нелинейную часть (2.4.30) – (2.4.33) таким образом, чтобы получившаяся схема имела второй порядок по времени относительно точки $(x_l, y_j, t_m + \tau/2)$:

$$\begin{aligned}
\frac{\hat{N} - N}{\tau} &= G - R, \quad l = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{0, P_y}, \\
\frac{\bar{n} - n}{0.5\tau} &= \kappa_x (\bar{n}_{\bar{x}\bar{x}} - Z_{\bar{x}\bar{x}}(n, \varphi)) + \kappa_y (n_{\bar{y}\bar{y}} - Z_{\bar{y}\bar{y}}(n, \varphi)) + G - R, \quad l = \overline{1, P_x - 1}, \quad j = \overline{1, P_y - 1}, \\
\frac{\hat{n} - \bar{n}}{0.5\tau} &= \kappa_x (\bar{n}_{\bar{x}\bar{x}} - Z_{\bar{x}\bar{x}}(\hat{n}, \hat{\varphi})) + \kappa_y (\hat{n}_{\bar{y}\bar{y}} - Z_{\bar{y}\bar{y}}(\hat{n}, \hat{\varphi})) + \hat{G} - \hat{R}, \quad l = \overline{1, P_x - 1}, \quad j = \overline{1, P_y - 1}, \\
\Lambda \hat{\varphi} &= \gamma(\hat{n} - \hat{N}), \quad l = \overline{1, P_x - 1}, \quad j = \overline{1, P_y - 1}. \\
\frac{\hat{I}^{m+1} - I^{m+1}}{h_y} + \delta_0 \delta^{0.5, 0.5} I &= 0, \quad i = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{1, P_y}.
\end{aligned} \tag{2.4.34}$$

Здесь для записи функции G , R , δ используются обозначения (2.1.5). Не трудно заметить, что нелинейные слагаемые в правой части представляют собой полусумму значений с верхнего и нижнего слоев по времени, а, как известно, данная сумма имеет второй порядок аппроксимации относительно центра рассматриваемого временного интервала.

Граничные условия (1.1.5) – (1.1.6) аппроксимируются с первым порядком по пространству и вторым по времени:

$$\begin{aligned}
\hat{\varphi}_{x,0j} &= \hat{\varphi}_{\bar{x}, P_x j} = -E_x, \quad j = \overline{0, P_y}, \quad \hat{\varphi}_{y,l0} = \hat{\varphi}_{\bar{y}, l P_y} = -E_y, \quad l = \overline{0, P_x}, \\
\bar{n}_{x,0j} + \mu_x \frac{n_{0.5j} + \hat{n}_{0.5j}}{2} E_x &= \bar{n}_{\bar{x}, P_x j} + \mu_x \frac{n_{P_x - 0.5j} + \hat{n}_{P_x - 0.5j}}{2} E_x = 0, \quad j = \overline{0, P_y}, \\
\hat{n}_{y,l0} + \mu_y \hat{n}_{l0.5} E_y &= \hat{n}_{\bar{y}, l P_y} + \mu_y \hat{n}_{l P_y - 0.5} E_y = 0, \quad l = \overline{0, P_x}, \\
I_{l0}^{m+1} &= e^{-\frac{(x_l - 0.5L_x)^2}{a_x^2}} (1 - e^{-10\bar{t}_{m+1}}), \quad l = \overline{0, P_x}, \quad I_{lj}^0 = 0.
\end{aligned} \tag{2.4.35}$$

Для решения системы (2.4.34) – (2.4.35) строится итерационный процесс (при его записи используются обозначения (2.4.1)):

$$\begin{aligned}
\frac{\hat{N} - N}{\tau} &= G - R, \quad l = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{0, P_y}, \\
\frac{\bar{n} - n}{0.5\tau} &= \kappa_x \left(\bar{n}_{\bar{x}\bar{x}} - Z_{\bar{x}\bar{x}}(n, \varphi) \right) + \kappa_y \left(n_{\bar{y}\bar{y}} - Z_{\bar{y}\bar{y}}(n, \varphi) \right) + G - R, \quad l = \overline{1, P_x - 1}, \quad j = \overline{1, P_y - 1}, \\
\frac{\hat{n} - \bar{n}}{0.5\tau} &= \kappa_x \left(\bar{n}_{\bar{x}\bar{x}} - Z_{\bar{x}\bar{x}}(\hat{n}, \hat{\varphi}) \right) + \kappa_y \left(\hat{n}_{\bar{y}\bar{y}} - Z_{\bar{y}\bar{y}}(\hat{n}, \hat{\varphi}) \right) + \hat{G} - \hat{R}, \quad l = \overline{1, P_x - 1}, \quad j = \overline{1, P_y - 1}, \\
\Lambda \hat{\varphi} &= \gamma(\hat{n} - \hat{N}), \quad l = \overline{1, P_x - 1}, \quad j = \overline{1, P_y - 1}. \\
\frac{\hat{I}^{m+1} - I^{m+1}}{h_y} + \delta_0 \delta^{0.5, 0.5} I &= 0, \quad l = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{1, P_y}.
\end{aligned} \tag{2.4.36}$$

Граничные условия (2.4.35) примут следующий вид:

$$\begin{aligned} \hat{\phi}_{x,0j}^{s+1} &= \hat{\phi}_{\bar{x},P_x,j}^{s+1} = -E_x, \quad j = \overline{0, P_y}, \quad \hat{\phi}_{y,l0}^{s+1} = \hat{\phi}_{\bar{y},lP_y}^{s+1} = -E_y, \quad l = \overline{0, P_x}, \\ \bar{n}_{x,0j}^{s+1} + \mu_x \frac{n_{0,5j}^s + \hat{n}_{0,5j}^s}{2} E_x &= \bar{n}_{\bar{x},P_x,j}^{s+1} + \mu_x \frac{n_{P_x-0,5j}^s + \hat{n}_{P_x-0,5j}^s}{2} E_x = 0, \quad j = \overline{0, P_y}, \\ \hat{n}_{y,l0}^{s+1} + \mu_y \hat{n}_{l0,5}^s E_y &= \hat{n}_{\bar{y},lP_y}^{s+1} + \mu_y \hat{n}_{lP_y-0,5}^s E_y = 0, \quad l = \overline{0, P_x}. \end{aligned} \quad (2.4.37)$$

Итерационный процесс повторяется до тех пор, пока не будет выполнен критерий сходимости:

$$\begin{aligned} |\hat{n}^{s+1} - \hat{n}^s| < |\hat{n}^s| \varepsilon_1 + \varepsilon_2, \quad |\hat{N}^{s+1} - \hat{N}^s| < |\hat{N}^s| \varepsilon_1 + \varepsilon_2, \quad |\hat{\phi}^{s+1} - \hat{\phi}^s| < |\hat{\phi}^s| \varepsilon_1 + \varepsilon_2, \\ \hat{I}^{m+1} - \hat{I}^{m+1} < |\hat{I}^{m+1}| \varepsilon_1 + \varepsilon_2, \quad l = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{0, P_y}. \end{aligned} \quad (2.4.38)$$

В качестве начального приближения для итерационного процесса используются значения сеточных функций с предыдущего временного слоя (2.4.19).

2.4.5 Исследование консервативности для 2D методов расщепления

Теорема 2.4.2. Если для разностной схемы (2.4.30) – (2.4.33) заданы однородные граничные условия ($E_x = 0$, $E_y = 0$), то она удовлетворяет закону сохранения заряда (2.1.16).

Доказательство. Для доказательства теоремы рассмотрим зависимость инварианта (2.1.16) от времени для разностной схемы (2.4.30), (2.4.32):

$$\begin{aligned} \frac{\hat{Q} - Q}{\tau} &= h_x h_y \sum_{i=1}^{P_x-1} \sum_{j=1}^{P_y-1} \left(\frac{\hat{n} - n}{\tau} - \frac{\hat{N} - N}{\tau} \right) = \\ &= \frac{h_x h_y}{2} \sum_{i=1}^{P_x-1} \sum_{j=1}^{P_y-1} \left(\kappa_x (\bar{n}_{\bar{x}\bar{x}} - Z_{\bar{x}\bar{x}}(n, \varphi)) + \kappa_y (n_{\bar{y}\bar{y}} - Z_{\bar{y}\bar{y}}(n, \varphi)) + \right. \\ &\quad \left. + \kappa_x (\bar{n}_{\bar{x}\bar{x}} - Z_{\bar{x}\bar{x}}(\bar{n}, \bar{\varphi})) + \kappa_y (\hat{n}_{\bar{y}\bar{y}} - Z_{\bar{y}\bar{y}}(\bar{n}, \bar{\varphi})) \right). \end{aligned} \quad (2.4.39)$$

Просуммируем слагаемые, входящие в правую часть (2.4.39) по формулам (2.1.30):

$$\begin{aligned} \frac{\hat{Q}-Q}{\tau} &= \frac{h_y \kappa_x}{2} \sum_{j=1}^{P_y-1} \left(\left(\bar{n}_{\bar{x}, P_x j} - \mu_x n_{P_x-0.5j} \varphi_{\bar{x}, P_x j} \right) - \left(\bar{n}_{x, 0j} - \mu_x n_{0.5j} \varphi_{x, 0j} \right) + \right. \\ &\quad \left. + \left(\bar{n}_{\bar{x}, P_x j} - \mu_x \bar{n}_{P_x-0.5j} \bar{\varphi}_{\bar{x}, P_x j} \right) - \left(\bar{n}_{x, 0j} - \mu_x \bar{n}_{0.5j} \bar{\varphi}_{x, 0j} \right) \right) + \\ &\quad + \frac{h_x \kappa_y}{2} \sum_{i=1}^{P_x-1} \left(\left(n_{\bar{y}, i P_y} - \mu_y n_{i P_y-0.5} \varphi_{\bar{y}, i P_y} \right) - \left(n_{y, i 0} - \mu_y n_{i 0.5} \varphi_{y, i 0} \right) + \right. \\ &\quad \left. + \left(\hat{n}_{\bar{y}, i P_y} - \mu_y \hat{n}_{i P_y-0.5} \hat{\varphi}_{\bar{y}, i P_y} \right) - \left(\hat{n}_{y, i 0} - \mu_y \hat{n}_{i 0.5} \hat{\varphi}_{y, i 0} \right) \right). \end{aligned} \quad (2.4.40)$$

С учетом граничных условий (2.4.31) и (2.4.33):

$$\begin{aligned} \frac{\hat{Q}-Q}{\tau} &= \frac{h_y \kappa_x}{2} \sum_{j=1}^{P_y-1} \left(\left(\bar{n}_{\bar{x}, P_x j} + \mu_x \bar{n}_{P_x-0.5j} E_x \right) - \left(\bar{n}_{x, 0j} + \mu_x \bar{n}_{0.5j} E_x \right) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{h_x \kappa_y}{2} \sum_{i=1}^{P_x-1} \left(\left(n_{\bar{y}, i P_y} + \mu_y n_{i P_y-0.5} E_y \right) - \left(n_{y, i 0} + \mu_y n_{i 0.5} E_y \right) \right) \right). \end{aligned} \quad (2.4.41)$$

Не трудно заметить, что правая часть (2.4.41) обращается в ноль если $E_x=0$, $E_y=0$, следовательно схема (2.4.30) – (2.4.33) удовлетворяет закону сохранения заряда. *Конец доказательства.*

Теорема 2.4.3. Разностная схема (2.4.34) с граничными условия первого порядка аппроксимации (2.4.35) удовлетворяет закону сохранения заряда (2.1.16).

Доказательство. Для доказательства теоремы рассмотрим зависимость инварианта (2.1.16) от времени для разностной схемы (2.4.34):

$$\begin{aligned} \frac{\hat{Q}-Q}{\tau} &= h_x h_y \sum_{i=1}^{P_x-1} \sum_{j=1}^{P_y-1} \left(\frac{\hat{n} - n}{\tau} - \frac{\hat{N} - N}{\tau} \right) = \\ &= \frac{h_x h_y}{2} \sum_{i=1}^{P_x-1} \sum_{j=1}^{P_y-1} \left(\kappa_x \left(\bar{n}_{\bar{x}x} - Z_{\bar{x}x}(n, \varphi) \right) + \kappa_y \left(n_{\bar{y}y} - Z_{\bar{y}y}(n, \varphi) \right) + \right. \\ &\quad \left. + \kappa_x \left(\bar{n}_{\bar{x}x} - Z_{\bar{x}x}(\hat{n}, \hat{\varphi}) \right) + \kappa_y \left(\hat{n}_{\bar{y}y} - Z_{\bar{y}y}(\hat{n}, \hat{\varphi}) \right) \right). \end{aligned} \quad (2.4.42)$$

Просуммируем слагаемые, входящие в правую часть (2.4.42) по формулам (2.1.30):

$$\begin{aligned} \frac{\hat{Q}-Q}{\tau} &= h_y \kappa_x \sum_{j=1}^{P_y-1} \left(\left(\bar{n}_{\bar{x}, P_x j} - \mu_x \frac{n_{P_x-0.5j} \varphi_{\bar{x}, P_x j} + \hat{n}_{P_x-0.5j} \hat{\varphi}_{\bar{x}, P_x j}}{2} \right) - \right. \\ &\quad \left. - \left(\bar{n}_{x, 0j} - \mu_x \frac{n_{0.5j} \varphi_{x, 0j} + \hat{n}_{0.5j} \hat{\varphi}_{x, 0j}}{2} \right) \right) + \\ &\quad + \frac{h_x \kappa_y}{2} \sum_{i=1}^{P_x-1} \left(\left(n_{\bar{y}, i P_y} - \mu_y n_{i P_y-0.5} \varphi_{\bar{y}, i P_y} \right) - \left(n_{y, i 0} - \mu_y n_{i 0.5} \varphi_{y, i 0} \right) + \right. \\ &\quad \left. + \left(\hat{n}_{\bar{y}, i P_y} - \mu_y \hat{n}_{i P_y-0.5} \hat{\varphi}_{\bar{y}, i P_y} \right) - \left(\hat{n}_{y, i 0} - \mu_y \hat{n}_{i 0.5} \hat{\varphi}_{y, i 0} \right) \right). \end{aligned} \quad (2.4.43)$$

С учетом граничных условий (2.4.35) правая часть (2.4.43) обращается в нуль. Следовательно, значение инварианта Q не изменяется на слоях по времени. *Конец доказательства.*

Теорема 2.4.4. Итерационный процесс (2.4.36) с граничными условия первого порядка аппроксимации по пространству (2.4.37) удовлетворяет закону сохранения заряда (2.1.16) на

итерациях ($\hat{Q}^{s+1} = \hat{Q}^s$).

Доказательство. Для итерационного процесса (2.4.36) равенство (2.4.43) записывается следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{\hat{Q}^{s+1} - Q}{\tau} = & h_y \kappa_x \sum_{j=1}^{P_y-1} \left(\left(\bar{n}_{\bar{x}, P_x j}^{s+1} - \mu_x \frac{n_{P_x-0.5j} \varphi_{\bar{x}, P_x j} + \hat{n}_{P_x-0.5j}^s \hat{\varphi}_{\bar{x}, P_x j}^s}{2} \right) - \right. \\ & \left. - \left(\bar{n}_{x, 0j}^{s+1} - \mu_x \frac{n_{0.5j} \varphi_{x, 0j} + \hat{n}_{0.5j}^s \hat{\varphi}_{x, 0j}^s}{2} \right) \right) + \\ & + \frac{h_x \kappa_y}{2} \sum_{i=1}^{P_x-1} \left(\left(n_{\bar{y}, iP_y} - \mu_y n_{iP_y-0.5} \varphi_{\bar{y}, iP_y} \right) - \left(n_{y, i0} - \mu_y n_{i0.5} \varphi_{y, i0} \right) + \right. \\ & \left. + \left(\hat{n}_{\bar{y}, iP_y}^{s+1} - \mu_y \hat{n}_{iP_y-0.5}^s \hat{\varphi}_{\bar{y}, iP_y}^s \right) - \left(\hat{n}_{y, i0}^{s+1} - \mu_y \hat{n}_{i0.5}^s \hat{\varphi}_{y, i0}^s \right) \right). \end{aligned} \quad (2.4.44)$$

С учетом граничных условий (2.4.37) правая часть (2.4.44) принимает следующий вид:

$$\frac{\hat{Q}^{s+1} - Q}{\tau} = \frac{h_x \kappa_y}{2} \sum_{i=1}^{P_x-1} \left(\left(n_{\bar{y}, iP_y} + \mu_y n_{iP_y-0.5} E_y \right) - \left(n_{y, i0} + \mu_y n_{i0.5} E_y \right) \right). \quad (2.4.45)$$

Т. к. правая часть (2.4.45) не содержит слагаемых, зависящих от номера итерации, то $\hat{Q}^{s+1} - \hat{Q}^s = 0$. Следовательно, значение инварианта Q сохраняется на итерациях. *Конец доказательства.*

§2.5. Некоторые оценки для сеточных функций на итерациях

В параграфе представлены оценки разностного решения на итерациях для двухэтапного итерационного процесса (2.4.2) – (2.4.11) с уравнением Шредингера (2.4.14), (2.4.15) и коэффициентом поглощения, зависящим от концентрации электронов (1.1.7) при отсутствии внешнего электрического поля (2.4.17).

При работе над параграфом использовались материалы из публикации автора [A12].

2.5.1. Положительность и ограниченность сеточной функции концентрации ионизированных доноров на итерациях

Запишем уравнение (2.4.2) в следующем виде:

$$\begin{aligned} \hat{N}^{s+1} \left(1 + 0.5\tau \left(q_0 |\hat{A}^s|^2 e^{-\psi + \xi\psi \hat{n}^s} + \frac{\hat{n}^s}{\tau_R} \right) \right) &= N \left(1 - 0.5\tau \left(q_0 |A|^2 e^{-\psi + \xi\psi n} + \frac{n}{\tau_R} \right) \right) + \\ + 0.5\tau q_0 e^{-\psi} \left(|\hat{A}^s|^2 e^{\xi\psi \hat{n}^s} + |A|^2 e^{\xi\psi n} \right) &+ \frac{n_0^2 \tau}{\tau_R}. \end{aligned} \quad (2.5.1)$$

Пусть функция N на предыдущих временных слоях положительна и ограничена:

$$0 < N \leq Q_N, \quad Q_N = const > 0, \quad (2.5.2)$$

сеточные функции n , \hat{n} также положительны и ограничены:

$$0 < n \leq Q_n, \quad Q_n = const > 0, \quad 0 < \hat{n} \leq Q_n + \varepsilon_n, \quad \varepsilon_n > 0, \quad (2.5.3)$$

и сеточная функция A на предыдущем временном слое и верхнем слое на S -ой итерации тоже ограничена:

$$\|A\|_C^2 \leq Q_A, \quad \|\hat{A}\|_C^2 \leq Q_A + \varepsilon_A, \quad Q_A = const > 0, \quad \varepsilon_A > 0. \quad (2.5.4)$$

$$\|A\|_C = \max_{i,j} |A|, \quad i = \overline{1, P_x - 1}, j = \overline{-P_y + 1, P_y - 1}. \quad (2.5.5)$$

Тогда из уравнения (2.5.1) следует, что имеет место положительность сеточной функции \hat{N}^{s+1} на верхнем временном слое, если выполнено условие:

$$\tau \leq \frac{2\tau_R}{q_0 \tau_R Q_A e^{-\psi + \psi \xi Q_n} + Q_n} \quad (2.5.6)$$

Для доказательства неравенства $\hat{N}^{s+1} < 1$ перепишем уравнение (2.5.1) в форме:

$$(1 - \hat{N}^{s+1}) \left(1 + 0.5\tau \left(q_0 |\hat{A}^s|^2 e^{-\psi + \xi\psi \hat{n}^s} + \frac{\hat{n}^s}{\tau_R} \right) \right) = (1 - N) \left(1 - 0.5\tau \left(q_0 |A|^2 e^{-\psi + \xi\psi n} + \frac{n}{\tau_R} \right) \right) + 0.5\tau \frac{\hat{n}^s + n - 2n_0^2}{\tau_R}. \quad (2.5.7)$$

Из равенства (2.5.7) следует, что значения разностной концентрации ионизированных доноров на $s+1$ -ой итерации меньше единицы ($\hat{N}^{s+1} < 1$), при выполнении условий (2.5.2) – (2.5.6). Как уже говорилось при доказательстве т. 2.2.2, значение n_0 меньше единицы и в начальный момент времени $n = n_0$, а значит неравенство $n > n_0^2$ выполнено на предыдущем временном слое. Таким образом если разностная концентрация ионизированных доноров на предыдущем временном слое меньше единицы: $N < 1$, и выполнено условие (2.5.6), то концентрация ионизированных доноров ограничена на итерациях: $\hat{N}^{s+1} < 1$.

Теорема 2.5.1. Если выполнены условия (2.5.2) – (2.5.6), то значение концентрации ионизированных доноров на $s+1$ итерации принадлежит интервалу от 0 до 1 ($0 < \hat{N}^{s+1} < 1$).

2.5.2. Однородная ограниченность сеточной функции концентрации ионизированных доноров на итерациях

В предыдущем пункте было показано, что функция \hat{N}^{s+1} ограничена единицей. Ниже продемонстрирована однородная ограниченность этой функции относительно итерационного процесса. Пусть выполнено неравенство (2.5.2), и концентрация ионизированных доноров на верхнем временном слое на s -ой итерации ограничена следующим образом:

$$\hat{N}^s \leq Q_N + \varepsilon_N. \quad (2.5.8)$$

Покажем, что тогда выполняется и неравенство:

$$\hat{N}^{s+1} \leq Q_N + \varepsilon_N. \quad (2.5.9)$$

Для этого перепишем уравнение (1.5.1) в следующем виде:

$$\hat{N}^{s+1} = \frac{N \left(1 - 0.5\tau \left(q_0 |A|^2 e^{-\psi + \xi\psi n} + \frac{n}{\tau_R} \right) \right) + 0.5\tau q_0 e^{-\psi} \left(|\hat{A}^s|^2 e^{\xi\psi \hat{n}^s} + |A|^2 e^{\xi\psi n} \right) + \frac{n_0^2 \tau}{\tau_R}}{1 + 0.5\tau \left(q_0 |\hat{A}^s|^2 e^{-\psi + \xi\psi \hat{n}^s} + \frac{\hat{n}^s}{\tau_R} \right)}. \quad (2.5.10)$$

Вместо (2.5.3) введем неравенства для норм:

$$\|n\|_C \leq Q_n, \quad \|\hat{n}\|_C \leq Q_n + \varepsilon_n, \quad (2.5.11)$$

тогда неравенство

$$\hat{N}^{s+1} \leq Q_N + \tau \left(\frac{n_0^2}{\tau_R} + 0.5q_0 e^{-\psi} e^{\xi\psi Q_n} \left((e^{\xi\psi\varepsilon_n} + 1) Q_A + e^{\xi\psi\varepsilon_n} \varepsilon_A \right) \right) \quad (2.5.12)$$

справедливо и при отсутствии предположения о положительности разностной концентрации свободных электронов на предыдущем временном слое и предыдущей итерации (2.5.3). Следовательно, если одновременно с (2.5.6) для разностного шага по времени выполняется также неравенство

$$\tau \leq \frac{\varepsilon_N}{\frac{n_0^2}{\tau_R} + 0.5q_0 e^{-\psi} e^{\xi\psi Q_n} \left((e^{\xi\psi\varepsilon_n} + 1) Q_A + e^{\xi\psi\varepsilon_n} \varepsilon_A \right)}, \quad (2.5.13)$$

тогда сеточная функция \hat{N}^{s+1} равномерно ограничена.

Теорема 2.5.2. Пусть выполнены условия (2.5.2), (2.5.4), (2.5.6), (2.5.8), (2.5.11) и (2.5.13), тогда сеточная функция \hat{N} равномерно ограничена на каждой итерации.

Замечание. Для функции \hat{N}^{s+2} равномерная ограниченность доказывается аналогично.

2.5.3. Ограниченность разности значений сеточной функции концентрации ионизированных доноров, полученных на соседних итерациях

Из уравнений (2.4.2) и (2.4.7), следует:

$$\hat{N}^{s+1} \hat{n}^s - \hat{N}^s \hat{n}^s = -\frac{0.5\tau}{\tau_R} \left(\hat{N}^{s+1} \hat{n}^s - \hat{N}^s \hat{n}^{s-1} \right) - 0.5\tau q_0 e^{-\psi} \left(\hat{N}^{s+1} |\hat{A}^s|^2 e^{\psi\xi\hat{n}^s} - \hat{N}^s |\hat{A}^{s-1}|^2 e^{\psi\xi\hat{n}^{s-1}} - (|\hat{A}^s|^2 e^{\psi\xi\hat{n}^s} - |\hat{A}^{s-1}|^2 e^{\psi\xi\hat{n}^{s-1}}) \right). \quad (2.5.14)$$

Правая часть уравнения (2.5.14), с учетом равенств

$$\hat{N}^{s+1} \hat{n}^s + \hat{N}^s \hat{n}^s - \hat{N}^s \hat{n}^s - \hat{N}^{s-1} \hat{n}^{s-1} = \hat{n}^s (\hat{N}^{s+1} - \hat{N}^s) + \hat{N}^s (\hat{n}^s - \hat{n}^{s-1}), \quad (2.5.15)$$

$$\hat{N}^{s+1} |\hat{A}^s|^2 e^{\psi\xi\hat{n}^s} - \hat{N}^s |\hat{A}^{s-1}|^2 e^{\psi\xi\hat{n}^{s-1}} = |\hat{A}^{s-1}|^2 e^{\psi\xi\hat{n}^s} \left(\hat{N}^{s+1} - \hat{N}^s \right) + \hat{N}^s e^{\psi\xi\hat{n}^s} \left(|\hat{A}^s|^2 - |\hat{A}^{s-1}|^2 e^{\psi\xi\hat{n}^s} \right) + \hat{N}^s |\hat{A}^{s-1}|^2 \left(e^{\psi\xi\hat{n}^s} - e^{\psi\xi\hat{n}^{s-1}} \right), \quad (2.5.16)$$

$$|\hat{A}^s|^2 e^{\psi \xi^s \hat{n}} \pm |\hat{A}^{s-1}|^2 e^{\psi \xi^{s-1} \hat{n}} - |\hat{A}^s|^2 e^{\psi \xi^s \hat{n}} = e^{\psi \xi^s \hat{n}} \left(|\hat{A}^s|^2 - |\hat{A}^{s-1}|^2 \right) + |\hat{A}^{s-1}|^2 \left(e^{\psi \xi^s \hat{n}} - e^{\psi \xi^{s-1} \hat{n}} \right) \quad (2.5.17)$$

преобразовывается к следующему виду:

$$\left(\hat{N}^{s+1} - \hat{N}^s \right) \left(1 + 0.5\tau \left(e^{-\psi} + \frac{1}{\tau_R} \right) \right) = 0.5\tau q_0 e^{-\psi} \left(1 - \hat{N}^s \right) \left(|\hat{A}^s|^2 (e^{\xi \psi \hat{n}} - e^{\xi \psi^{s-1} \hat{n}}) + e^{\xi \psi \hat{n}} (|\hat{A}^s|^2 - |\hat{A}^{s-1}|^2) \right) - \frac{0.5\tau}{\tau_R} \left(\hat{n}^s - \hat{n}^{s-1} \right). \quad (2.5.18)$$

Если использовать разложение в ряд Тейлора для экспоненциальных членов (или свойство Липшиц-непрерывности), то

$$|e^{\xi \psi \hat{n}} - e^{\xi \psi^{s-1} \hat{n}}| \leq M_n |\hat{n}^s - \hat{n}^{s-1}| \quad (2.5.19)$$

где M_n - постоянная Липшица. В итоге получается неравенство:

$$|\hat{N}^{s+1} - \hat{N}^s| \leq \frac{0.5\tau q_0 e^{-\psi} (|\hat{n}^s - \hat{n}^{s-1}| I_m M_n + e^{\xi \psi (Q_n + \varepsilon_n)} ||\hat{A}^s|^2 - |\hat{A}^{s-1}|^2|) + 0.5\tau |\hat{n}^s - \hat{n}^{s-1}| / \tau_R}{\left(1 + 0.5\tau \left(e^{-\psi} + \frac{1}{\tau_R} \right) \right)} \leq \frac{\tau}{2} q_0 e^{-\psi} \left(|\hat{n}^s - \hat{n}^{s-1}| I_m M_n + e^{\xi \psi (Q_n + \varepsilon_n)} ||\hat{A}^s|^2 - |\hat{A}^{s-1}|^2| \right) + \frac{\tau}{2\tau_R} |\hat{n}^s - \hat{n}^{s-1}|, \quad (2.5.20)$$

где $I_m = Q_A + \varepsilon_A$.

Аналогичным способом получается и неравенство для следующей соседней пары итераций $s+2$ и $s+1$:

$$|\hat{N}^{s+2} - \hat{N}^{s+1}| \leq \frac{\tau}{2} q_0 e^{-\psi} \left(|\hat{n}^{s+1} - \hat{n}^s| I_m M_n + e^{\xi \psi (Q_n + \varepsilon_n)} ||\hat{A}^{s+1}|^2 - |\hat{A}^s|^2| \right) + \frac{\tau}{2\tau_R} |\hat{n}^{s+1} - \hat{n}^s|. \quad (2.5.21)$$

2.5.4. Равномерная ограниченность сеточной функции концентрации свободных электронов на итерациях в норме L_1

Просуммируем обе части уравнения (2.4.3), умножив их на шаги h_x, h_y . Принимая во внимание граничные условия (2.4.6) и формулы (2.1.32), (2.1.33), получим:

$$\sum_{j=1}^{P_y-1} \sum_{k=1}^{P_x-1} h_x h_y \frac{\hat{n}^{s+1} - n}{\tau} = \sum_{j=1}^{P_y-1} \sum_{k=1}^{P_x-1} \frac{h_x h_y}{2} \left[\begin{array}{l} q_0 ((1 - \hat{N}) |\hat{A}|^2 e^{-\psi + \xi \psi \hat{n}} + (1 - N) |A|^2 e^{-\psi + \xi \psi n}) - \\ - \left(\frac{\hat{N} \hat{n} - n_0^2}{\tau_R} + \frac{Nn - n_0^2}{\tau_R} \right) \end{array} \right]. \quad (2.5.22)$$

С учетом равномерной ограниченности, положительности и ограниченности функции \hat{N}^{s+1} из (2.5.22) следует неравенство для \hat{n}^{s+1} :

$$\|\hat{n}^{s+1}\|_{L_1} \leq \|n\|_{L_1} + \frac{\tau}{2} q_0 e^{-\psi} \left(\|e^{\xi \psi \hat{n}}\|_{L_1} (Q_A + \varepsilon_A) + \|e^{\xi \psi n}\|_{L_1} Q_A \right) + \frac{\tau}{\tau_R} n_0^2 L_x L_y + \frac{\tau}{2\tau_R} \left(\|n\|_{L_1} + \|\hat{n}^s\|_{L_1} \right). \quad (2.5.23)$$

При записи нормы $\|\hat{n}^{s+1}\|_{L_1}$ предполагалось, что значения \hat{n}^{s+1} положительны. В общем случае необходимо использовать модуль от этой функции.

Так как при записи (2.5.11) предполагалась ограниченность сеточных функций n, \hat{n}^s в норме C , то эти сеточные функции также будут ограничены и в норме L_1 в соответствии с эквивалентностью норм во всех конечномерных пространствах [218].

Следовательно, справедливы оценки:

$$\|n\|_{L_1} \leq \bar{Q}_n, \quad \bar{Q}_n = \text{const} > 0, \quad \|\hat{n}^s\|_{L_1} \leq \bar{Q}_n + \bar{\varepsilon}_n, \quad \bar{\varepsilon}_n > 0. \quad (2.5.24)$$

Замечание. Другой подход к доказательству ограниченности нормы $\|\hat{n}^s\|_{L_1}$ следует из сохранения инварианта $Q(t_m) = 0$ (теорема 2.4.1) и ограниченности нормы $\|\hat{N}^s\|_{L_1}$.

Таким образом, с учетом условий (2.5.4), если разностный шаг по времени удовлетворяет неравенству:

$$\tau \leq \frac{2\bar{\varepsilon}_n}{q_0 e^{-\psi} \left(\|e^{\xi \psi (Q_n + \varepsilon_n)}\|_{L_1} (Q_A + \varepsilon_A) + \|e^{\xi \psi Q_n}\|_{L_1} Q_A \right) + \frac{2}{\tau_R} n_0^2 L_x L_y + \frac{1}{\tau_R} (2\bar{Q}_n + \bar{\varepsilon}_n)}, \quad (2.5.25)$$

то

$$\|\hat{n}^{s+1}\|_{L_1} \leq \bar{Q}_n + \bar{\varepsilon}_n \quad (2.5.26)$$

и, следовательно, сеточная функция \hat{n}^{s+1} равномерно ограничена.

Аналогичная оценка может быть получена для сеточной функции при рассмотрении уравнения (2.4.8):

$$\|\hat{n}\|_{L_1}^{s+2} \leq \|n\|_{L_1} + \frac{\tau}{2} q_0 e^{-\psi} \left(\left\| e^{\xi\psi} \hat{n}^{s+1} \right\|_{L_1} (Q_A + \varepsilon_A) + \left\| e^{\xi\psi n} \right\|_{L_1} Q_A \right) + \frac{\tau}{\tau_R} n_0^2 L_x L_y + \frac{\tau}{2\tau_R} \left(\|n\|_{L_1} + \|\hat{n}\|_{L_1}^{s+1} \right). \quad (2.5.27)$$

Из (2.5.27) следует, что если шаг разностной сетки по времени удовлетворяет неравенству (2.5.25), то

$$\|\hat{n}\|_{L_1}^{s+2} \leq \bar{Q}_n + \bar{\varepsilon}_n. \quad (2.5.28)$$

Теорема 2.5.3. Сеточная функция \hat{n} равномерно ограничена на итерациях в норме L_1 , если выполнены условия (2.5.2), (2.5.4), (2.5.6), (2.5.8), (2.5.11), (2.5.24) и (2.5.25).

2.5.5. Ограниченность разности значений сеточной функции концентрации ионизированных доноров, полученных на соседних итерациях

Из записи двухэтапного итерационного процесса (2.4.2) – (2.4.11) следуют равенства:

$$(1 - 0.5\tau\kappa_x \Lambda_{\bar{x}\bar{x}}^{s+1}) (\hat{n}^s - \hat{n}^{s+1}) = 0.5\tau\kappa_x \Lambda_{\bar{x}\bar{x}} (\hat{n}^s - \hat{n}^{s-1}) + (\hat{N}^s - \hat{N}^{s+1}) - 0.5\tau \left(\kappa_x \left(Z_{\bar{x}\bar{x}}^s (\hat{n}, \hat{\phi}) - Z_{\bar{x}\bar{x}}^{s-2} (\hat{n}, \hat{\phi}) \right) + \kappa_y \left(Z_{\bar{y}\bar{y}}^s (\hat{n}, \hat{\phi}) - Z_{\bar{y}\bar{y}}^{s-1} (\hat{n}, \hat{\phi}) \right) \right), \quad (2.5.29)$$

$$(1 - 0.5\tau\kappa_y \Lambda_{\bar{y}\bar{y}}^{s+2}) (\hat{n}^s - \hat{n}^{s+1}) = 0.5\tau\kappa_y \Lambda_{\bar{y}\bar{y}} (\hat{n}^s - \hat{n}^{s-1}) + (\hat{N}^s - \hat{N}^{s+1}) - 0.5\tau\kappa_y \left(Z_{\bar{y}\bar{y}}^{s+1} (\hat{n}, \hat{\phi}) - Z_{\bar{y}\bar{y}}^s (\hat{n}, \hat{\phi}) \right). \quad (2.5.30)$$

Если ввести разностные операторы

$$B_{nx} = 1 - 0.5\tau\kappa_x \Lambda_{\bar{x}\bar{x}}, \quad B_{ny} = 1 - 0.5\tau\kappa_y \Lambda_{\bar{y}\bar{y}}, \quad (2.5.31)$$

то уравнения (2.5.29) и (2.5.30) переписываются в виде:

$$(\hat{n}^s - \hat{n}^{s+1}) = 0.5\tau\kappa_x B_{nx}^{-1} \Lambda_{\bar{x}\bar{x}} (\hat{n}^s - \hat{n}^{s-1}) + B_{nx}^{-1} (\hat{N}^s - \hat{N}^{s+1}) - 0.5\tau B_{nx}^{-1} \left(\kappa_x \left(Z_{\bar{x}\bar{x}}^s (\hat{n}, \hat{\phi}) - Z_{\bar{x}\bar{x}}^{s-2} (\hat{n}, \hat{\phi}) \right) + \kappa_y \left(Z_{\bar{y}\bar{y}}^s (\hat{n}, \hat{\phi}) - Z_{\bar{y}\bar{y}}^{s-1} (\hat{n}, \hat{\phi}) \right) \right), \quad (2.5.32)$$

$$(\hat{n}^{s+2} - \hat{n}^{s+1}) = 0.5\tau\kappa_y B_{ny}^{-1} \Lambda_{\bar{y}\bar{y}} (\hat{n}^{s+1} - \hat{n}^s) + B_{ny}^{-1} (\hat{N}^{s+2} - \hat{N}^{s+1}) - 0.5\tau\kappa_y B_{ny}^{-1} \left(Z_{\bar{y}\bar{y}}^{s+1}(\hat{n}^s, \hat{\phi}^s) - Z_{\bar{y}\bar{y}}^s(\hat{n}^s, \hat{\phi}^s) \right). \quad (2.5.33)$$

Таким образом, получим неравенства в норме C :

$$\left\| (\hat{n}^{s+1} - \hat{n}^s) \right\|_C \leq \frac{\tau\kappa_x c_x}{2h_x^2} \left\| (\hat{n}^s - \hat{n}^{s-1}) \right\|_C + \left\| \hat{N}^{s+1} - \hat{N}^s \right\|_C + \tau(Q_n + \varepsilon_n) \left(\frac{\mu_x \kappa_x}{h_x} + \frac{\mu_y \kappa_y}{h_y} \right) (\bar{Q}_n + \bar{\varepsilon}_n + \bar{Q}_N + \bar{\varepsilon}_N), \quad (2.5.34)$$

$$\left\| (\hat{n}^{s+2} - \hat{n}^{s+1}) \right\|_C \leq \frac{\tau\kappa_y c_y}{2h_y^2} \left\| (\hat{n}^{s+1} - \hat{n}^s) \right\|_C + \left\| \hat{N}^{s+2} - \hat{N}^{s+1} \right\|_C + \frac{\tau}{2} (Q_n + \varepsilon_n) \frac{\mu_y \kappa_y}{h_y} (\bar{Q}_n + \bar{\varepsilon}_n + \bar{Q}_N + \bar{\varepsilon}_N). \quad (2.5.35)$$

Замечание. Оценку для сеточной функции φ через концентрации n и N можно получить, построив разностный аналог неравенства (1.4.15).

2.5.6. Равномерная ограниченность сеточной функции комплексной амплитуды на итерациях в норме C

В т. 2.2.3 было показано, что если шаг сетки по времени удовлетворяет условию (2.2.12), то для разностной функции комплексной амплитуды в норме L_2 справедлива следующая оценка:

$$\left\| \hat{A} \right\|_{L_2}^2 \leq q^m \left\| A_0 \right\|_{L_2}^2. \quad (2.5.36)$$

Так как все нормы в конечномерных пространствах эквивалентны [218], то ниже докажем ограниченность сеточных функций A и \hat{A}^s в норме C . Покажем, что для сеточной амплитуды \hat{A}^{s+1} справедлива оценка:

$$\left\| \hat{A} \right\|_C^{s+1} \leq Q_A + \varepsilon_A. \quad (2.5.37)$$

Условие (2.5.37) означает равномерную ограниченность этой функции на верхнем временном слое по времени. Для доказательства этого запишем уравнение (2.4.14) в следующем виде:

$$\hat{A}^{s+1} = B_x^{-1} B_x^* A - i\tau D_{A_y} B_x^{-1} \Lambda_{\bar{y}\bar{y}}^{0.5} A - \frac{\tau\beta_A \delta_0}{4} B_x^{-1} e^{-\psi} \left((1 - \hat{N}) e^{\psi \xi \hat{n}} + (1 - N) e^{\psi \xi n} \right)^{0.5} A, \quad (2.5.38)$$

где введены обозначения для разностных операторов:

$$B_x = \left(E + i \frac{\tau}{2} D_{A_x} \Lambda_{\bar{x}x} \right), \quad B_x^* = \left(E - i \frac{\tau}{2} D_{A_x} \Lambda_{\bar{x}x} \right). \quad (2.5.39)$$

Умножив уравнение (2.5.38) на оператор B_x^{-1} слева и учитывая оценки для операторов [10]:

$$\|B_x^{-1} B_x^*\|_C \leq 1, \quad \|B_x^{-1}\|_C < 1, \quad \|\Lambda_{\bar{y}y}\|_C \leq \frac{c_y}{h_y^2}, \quad c_y = \text{const} > 0 \quad (2.5.40)$$

и ограниченность сеточных функций n, \hat{n}, N, \hat{N} в этих нормах, а так же, что $\|\hat{N}\|_C < 1$, получим:

$$\|\hat{A}\|_C^{s+1} \leq \|A\|_C + \tau (2Q_A + \varepsilon_A) \left(\frac{c_y}{2h_y^2} D_{A_y} + \frac{\beta_A \delta_0}{4} e^{-\psi(1-\xi Q_n)} (1 + e^{\psi \xi \varepsilon_n}) \right). \quad (2.5.41)$$

Следовательно, неравенство (2.5.38) будет выполнено, если верно ограничение для разностного шага по времени:

$$\tau \leq \frac{4h_y^2 \varepsilon_A}{(2Q_A + \varepsilon_A) \left(c_y D_{A_y} + h_y^2 \beta_A \delta_0 e^{-\psi(1-\xi Q_n)} (1 + e^{\psi \xi \varepsilon_n}) \right)}. \quad (2.5.42)$$

Проведя аналогичные преобразования для сеточной функции \hat{A}^{s+2} , из (2.4.15) получим, что

$$\|\hat{A}\|_C^{s+2} \leq \|A\|_C + \tau (2Q_A + \varepsilon_A) \left(\frac{c_x}{2h_x^2} D_{A_x} + \frac{\beta_A \delta_0}{4} e^{-\psi(1-\xi Q_n)} (1 + e^{\psi \xi \varepsilon_n}) \right). \quad (2.5.43)$$

Следовательно, неравенство

$$\|\hat{A}\|_C^{s+2} \leq Q_A + \varepsilon_A \quad (2.5.44)$$

будет выполнено при условии, что

$$\tau \leq \frac{4h_x^2 \varepsilon_A}{(2Q_A + \varepsilon_A) \left(c_x D_{A_x} + h_x^2 \beta_A \delta_0 e^{-\psi(1-\xi Q_n)} (1 + e^{\psi \xi \varepsilon_n}) \right)}. \quad (2.5.45)$$

Таким образом, справедлива следующая теорема:

Теорема 2.5.4. Сеточная функция \hat{A} равномерно ограничена на итерациях, если выполнены условия (2.5.2), (2.5.4), (2.5.6), (2.5.11), (2.5.43) и (2.5.45).

2.5.7. Ограниченность разности значений сеточной функции комплексной амплитуды оптического импульса, полученных на итерациях

Используя разностное уравнение (2.4.14) для сеточной функции \hat{A}^{s+1} и аналогичное разностное уравнение для сеточной функции \hat{A}^s (2.4.15), мы получим следующее уравнение относительно разности этих функций:

$$\hat{A}^{s+1} - \hat{A}^s + i0.5\tau D_{A_x} (\hat{A}_{\bar{x}\bar{x}}^{s+1} - \hat{A}_{\bar{x}\bar{x}}^s + \hat{A}_{\bar{x}\bar{x}}^s - \hat{A}_{\bar{x}\bar{x}}^{s-1}) + \tau \frac{\beta_A \delta_0}{2} (\delta_{0.5 0.5}^s A - \delta_{0.5 0.5}^{s-1} A) = 0 \quad (2.5.46)$$

или, учитывая (2.5.39),

$$B_x (\hat{A}^{s+1} - \hat{A}^s) + i0.5\tau D_{A_x} (\hat{A}_{\bar{x}\bar{x}}^s - \hat{A}_{\bar{x}\bar{x}}^{s-1}) + 0.5\tau \beta_A \delta_0 (\delta_{0.5 0.5}^s A - \delta_{0.5 0.5}^{s-1} A) = 0. \quad (2.5.47)$$

Чтобы записать это разностное уравнение в нужном для доказательства виде, преобразуем последнюю разность в уравнении (2.5.47) следующим образом:

$$\left(\hat{A}^s - \hat{A}^{s-1} \right) \left(e^{\psi \xi \hat{n}} (1 - \hat{N}) + (1 - N) e^{\psi \xi n} \right) + \left(\hat{A}^{s-1} + A \right) (1 - \hat{N}) \left(e^{\psi \xi \hat{n}} - e^{\psi \xi \hat{n}^{s-1}} \right) - e^{\psi \xi \hat{n}} (\hat{N} - \hat{N}^{s-1}) \left(\hat{A}^{s-1} + A \right). \quad (2.5.48)$$

Далее, используя (2.5.19), выражение (2.5.48) преобразуется к виду:

$$\left(\hat{A}^s - \hat{A}^{s-1} \right) \left(e^{\psi \xi \hat{n}} (1 - \hat{N}) + (1 - N) e^{\psi \xi n} \right) + \left(\hat{A}^{s-1} + A \right) (1 - \hat{N}) M_n (\hat{n} - \hat{n}^{s-1}) - (\hat{N} - \hat{N}^{s-1}) e^{\psi \xi \hat{n}} (\hat{A}^{s-1} + A). \quad (2.5.49)$$

Таким образом, вместо уравнения (2.5.47) получим:

$$B_x (\hat{A}^{s+1} - \hat{A}^s) + \frac{\tau}{2} \left(iD_{A_x} \Lambda_{\bar{x}\bar{x}} + \frac{\beta_A \delta_0}{4} e^{-\psi} \left(e^{\psi \xi \hat{n}} (1 - \hat{N}) + (1 - N) e^{\psi \xi n} \right) \right) (\hat{A}^s - \hat{A}^{s-1}) + \frac{\tau \beta_A \delta_0}{8} e^{-\psi} \left(\left(\hat{A}^{s-1} + A \right) (1 - \hat{N}) M_n (\hat{n} - \hat{n}^{s-1}) - (\hat{N} - \hat{N}^{s-1}) e^{\psi \xi \hat{n}} (\hat{A}^{s-1} + A) \right) = 0. \quad (2.5.50)$$

Аналогичным образом можно преобразовать уравнение (2.4.15), описывающее переход между $s+2$ и $s+1$ итерациями:

$$B_y (\hat{A}^{s+2} - \hat{A}^{s+1}) + i0.5\tau D_{A_y} \Lambda_{\bar{y}\bar{y}} (\hat{A}_{\bar{y}\bar{y}}^{s+1} - \hat{A}_{\bar{y}\bar{y}}^s) + \tau \frac{\beta_A \delta_0}{2} (\delta_{0.5 0.5}^{s+1} A - \delta_{0.5 0.5}^s A) = 0. \quad (2.5.51)$$

Применяя некоторые алгебраические преобразования, получим уравнение аналогичное уравнению (2.5.50):

$$B_y \left(\hat{A}^{s+2} - \hat{A}^{s+1} \right) + \frac{\tau}{2} \left(iD_{A_y} \Lambda_{\bar{y}\bar{y}} + \frac{\beta_A \delta_0}{4} e^{-\psi} \left(e^{\psi \xi^{\hat{n}^{s+1}}} (1 - \hat{N}^{s+1}) + (1 - N) e^{\psi \xi^n} \right) \right) \left(\hat{A}^{s+1} - \hat{A}^s \right) + \frac{\tau \beta_A \delta_0}{8} e^{-\psi} \left(\left(\hat{A}^s + A \right) (1 - \hat{N}^s) M_n \left(\hat{n}^{s+1} - \hat{n}^s \right) - (\hat{N}^{s+1} - \hat{N}^s) e^{\psi \xi^{\hat{n}^{s+1}}} \left(\hat{A}^s + A \right) \right) = 0. \quad (2.5.52)$$

Следующий шаг заключается в оценке разности значений комплексной амплитуды \hat{A} на соседних итерациях: $s+1$ и s , $s+2$ и $s+1$.

Для этого перепишем уравнения (2.5.50) и (2.5.52) умножив их слева на B_x^{-1} , B_y^{-1} , соответственно, и учтем полученные выше операторные оценки. Таким образом будут справедливы следующие неравенства:

$$\left\| \left(\hat{A}^{s+1} - \hat{A}^s \right) \right\|_C \leq 0.5\tau \left(\frac{D_{A_x} c_x}{h_x^2} + \frac{\beta_A \delta_0}{4} e^{\psi \xi Q_n} (1 + e^{\psi \xi \varepsilon_n}) \right) \left\| \left(\hat{A}^s - \hat{A}^{s-1} \right) \right\|_C + \frac{\tau \beta_A \delta_0}{8} (2Q_A + \varepsilon_A) \left(M_n \left\| \left(\hat{n}^s - \hat{n}^{s-1} \right) \right\|_C + e^{\psi \xi (Q_n + \varepsilon_n)} \left\| \left(\hat{N}^s - \hat{N}^{s-1} \right) \right\|_C \right), \quad (2.5.53)$$

$$\left\| \left(\hat{A}^{s+2} - \hat{A}^{s+1} \right) \right\|_C \leq 0.5\tau \left(\frac{D_{A_y} c_y}{h_y^2} + \frac{\beta_A \delta_0}{4} e^{\psi \xi Q_n} (1 + e^{\psi \xi \varepsilon_n}) \right) \left\| \left(\hat{A}^{s+1} - \hat{A}^s \right) \right\|_C + \frac{\tau \beta_A \delta_0}{8} (2Q_A + \varepsilon_A) \left(M_n \left\| \left(\hat{n}^{s+1} - \hat{n}^s \right) \right\|_C + e^{\psi \xi (Q_n + \varepsilon_n)} \left\| \left(\hat{N}^{s+1} - \hat{N}^s \right) \right\|_C \right). \quad (2.5.54)$$

2.5.8. Сходимость двухэтапного итерационного процесса

Объединив все полученные выше условия равномерной ограниченности сеточных функций на итерациях (2.5.2), (2.5.4), (2.5.6), (2.5.8), (2.5.11), (2.5.13), (2.5.24), (2.5.25), (2.5.43), (2.5.45) (т. 2.5.2, 2.5.3 и 2.5.4) и условия для разности значений функций на итерациях (2.5.20), (2.5.22), (2.5.34), (2.5.35), (2.5.53), (2.5.54), получим отношения для шагов разностной сетки:

$$\tau < \min \left\{ \frac{h_x^2}{C_1}, \frac{h_y^2}{C_2} \right\}, \quad C_1, C_2 > 0, \quad (2.5.55)$$

где параметры C_1, C_2 зависят от параметров дифференциальной задачи.

Кроме того из записи двухэтапного итерационного процесса (2.4.2) – (2.4.11), (2.4.14), (2.4.15) и теоремы 2.4.1 в случае отсутствия внешнего поля следуют равенства:

$$\sum_{j=1}^{P_y-1} \sum_{k=1}^{P_x-1} h_x h_y (\hat{n}^{s+1} - \hat{n}^s) = \sum_{j=1}^{P_y-1} \sum_{k=1}^{P_x-1} h_x h_y (\hat{N}^{s+1} - \hat{N}^s) = \tau \sum_{j=1}^{P_y-1} \sum_{k=1}^{P_x-1} h_x h_y (G - R), \quad (2.5.56)$$

$$\sum_{j=1}^{P_y-1} \sum_{k=1}^{P_x-1} h_x h_y (\hat{n}^{s+2} - \hat{n}^{s+1}) = \sum_{j=1}^{P_y-1} \sum_{k=1}^{P_x-1} h_x h_y (\hat{N}^{s+2} - \hat{N}^{s+1}) = \tau \sum_{j=1}^{P_y-1} \sum_{k=1}^{P_x-1} h_x h_y (G - R). \quad (2.5.57)$$

С учетом полученных соотношений справедлива следующая теорема:

Теорема 2.5.5. Итерационный процесс (2.4.2) – (2.4.11), (2.4.14), (2.4.15) сходится со скоростью геометрической прогрессии со знаменателем $q = \min \tau \left\{ \frac{C_1}{h_x^2}, \frac{C_2}{h_y^2} \right\}$, если выполняется неравенство (2.5.55).

Таким образом данным пункте доказана равномерная ограниченность сеточных функций на каждой итерации и сходимости итерационного процесса (ограниченность разности значений функций на соседних итерациях). Это означает справедливость следующей теоремы:

Теорема 2.5.6. Решение дифференциальной задачи (1.1.1) – (1.1.3), (1.1.12) существует на верхнем временном слое.

§2.6. Методы реализации разностных схем для рассмотренной 3D задачи

При работе над параграфом использовались материалы из публикаций автора [A11, A13].

2.6.1. Трехэтапный итерационный процесс, реализующий консервативную разностную схему для 3D нестационарных задач

Для реализации консервативной нелинейной схемы (2.3.4) – (2.3.8) построим трехэтапный итерационный процесс (ТЭИП). Для этого, в дополнение к обозначениям, используемых для

записи двухэтапного итерационного процесса (2.4.1), введем оператор по продольной координате z :

$$\overset{s}{Z}_{\bar{z}}(n, \varphi) = (\overset{s}{Z}_{\bar{z}}(\hat{n}, \hat{N}) + \overset{s}{Z}_{\bar{z}}(n, \varphi)) / 2. \quad (2.6.1)$$

Тогда первый этап ТЭИП для разностной схемы (2.3.4) – (2.3.8) записывается в следующем виде:

$$\frac{\overset{s+1}{\hat{N}} - N}{\tau} = \overset{s+1}{G} - \overset{s+1}{R}, \quad l = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{0, P_y}, \quad k = \overline{0, P_z}, \quad (2.6.2)$$

$$\frac{\overset{s+1}{\hat{n}} - n}{\tau} = \kappa_x \left(\overset{s+1}{n}_{\bar{x}\bar{x}} - \overset{s}{Z}_{\bar{x}\bar{x}}(n, \varphi) \right) + \kappa_y \left(\overset{s}{n}_{\bar{y}\bar{y}} - \overset{s}{Z}_{\bar{y}\bar{y}}(n, \varphi) \right) + \kappa_z \left(\overset{s}{n}_{\bar{z}\bar{z}} - \overset{s}{Z}_{\bar{z}\bar{z}}(n, \varphi) \right) + \overset{s+1}{G} - \overset{s+1}{R}, \quad (2.6.3)$$

$$\Lambda \overset{s+1}{\hat{\varphi}} = \gamma(\overset{s+1}{\hat{n}} - \overset{s+1}{\hat{N}}), \quad l = \overline{1, P_x - 1}, \quad j = \overline{1, P_y - 1}, \quad k = \overline{1, P_z - 1}, \quad (2.6.4)$$

$$\frac{\overset{s+1}{\hat{I}}^{m+1} - I^{m+1}}{h_z} + \delta_0 \overset{s+1}{\delta} I^{m+1} = 0, \quad l = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{0, P_y}, \quad k = \overline{1, P_z}, \quad (2.6.5)$$

с граничными условиями:

$$\begin{aligned} \overset{s+1}{\hat{\varphi}}_{x,0jk} &= \overset{s+1}{\hat{\varphi}}_{\bar{x}, P_x jk} = -E_x, \quad \overset{s+1}{\hat{n}}_{x,0jk} + \mu_x \overset{s}{\hat{n}}_{0.5jk} E_x = \overset{s+1}{\hat{n}}_{\bar{x}, P_x jk} + \mu_x \overset{s}{\hat{n}}_{P_x - 0.5jk} E_x = 0, \quad j = \overline{0, P_y}, \quad k = \overline{0, P_z}, \\ \overset{s+1}{\hat{\varphi}}_{y,l0k} &= \overset{s+1}{\hat{\varphi}}_{\bar{y}, l P_y k} = -E_y, \quad \overset{s+1}{\hat{n}}_{y,l0k} + \mu_y \overset{s+1}{\hat{n}}_{l0.5k} E_y = \overset{s+1}{\hat{n}}_{\bar{y}, l P_y k} + \mu_y \overset{s+1}{\hat{n}}_{l P_y - 0.5k} E_y = 0, \quad l = \overline{0, P_x}, \quad k = \overline{0, P_z}, \\ \overset{s+1}{\hat{\varphi}}_{z,lj0} &= \overset{s+1}{\hat{\varphi}}_{\bar{z}, l j P_z} = -E_z, \quad \overset{s+1}{\hat{n}}_{z,lj0} + \mu_z \overset{s+1}{\hat{n}}_{lj0.5} E_z = \overset{s+1}{\hat{n}}_{\bar{z}, l j P_z} + \mu_z \overset{s+1}{\hat{n}}_{l j P_z - 0.5} E_z = 0, \quad l = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{0, P_y}, \end{aligned} \quad (2.6.6)$$

$$I_{ij0}^{m+1} = e^{-\frac{(x_i - 0.5L_x)^2}{a_x^2} - \frac{(y_j - 0.5L_y)^2}{a_y^2}} (1 - e^{-10\bar{r}_{m+1}}), \quad l = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{0, P_y}.$$

Второй этап ТЭИП выглядит следующим образом:

$$\frac{\overset{s+2}{\hat{N}} - N}{\tau} = \overset{s+2}{G} - \overset{s+2}{R}, \quad l = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{0, P_y}, \quad k = \overline{0, P_z}, \quad (2.6.7)$$

$$\frac{\overset{s+2}{\hat{n}} - n}{\tau} = \kappa_x \left(\overset{s+1}{n}_{\bar{x}\bar{x}} - \overset{s}{Z}_{\bar{x}\bar{x}}(n, \varphi) \right) + \kappa_y \left(\overset{s+2}{n}_{\bar{y}\bar{y}} - \overset{s+1}{Z}_{\bar{y}\bar{y}}(n, \varphi) \right) + \kappa_z \left(\overset{s}{n}_{\bar{z}\bar{z}} - \overset{s}{Z}_{\bar{z}\bar{z}}(n, \varphi) \right) + \overset{s+2}{G} - \overset{s+2}{R}, \quad (2.6.8)$$

$$l = \overline{1, P_x - 1}, \quad j = \overline{1, P_y - 1}, \quad k = \overline{1, P_z - 1},$$

$$\Lambda \hat{\varphi} = \gamma(\hat{n} - \hat{N}), \quad l = \overline{1, P_x - 1}, \quad j = \overline{1, P_y - 1}, \quad k = \overline{1, P_z - 1}, \quad (2.6.9)$$

$$\frac{\hat{I}^{m+1} - I^{m+1}}{h_z} + \delta_0 \delta^{s+2}_{0.5} I^{m+1} = 0, \quad l = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{0, P_y}, \quad k = \overline{1, P_z}, \quad (2.6.10)$$

с граничными условиями:

$$\begin{aligned} \hat{\varphi}_{x,0jk}^{s+2} &= \hat{\varphi}_{\bar{x},P_xjk}^{s+2} = -E_x, \quad \hat{n}_{x,0jk}^{s+2} + \mu_x \hat{n}_{0.5jk}^{s+2} E_x = \hat{n}_{\bar{x},P_xjk}^{s+2} + \mu_x \hat{n}_{P_x-0.5jk}^{s+2} E_x = 0, \quad j = \overline{0, P_y}, \quad k = \overline{0, P_z}, \\ \hat{\varphi}_{y,i0k}^{s+2} &= \hat{\varphi}_{\bar{y},lP_yk}^{s+2} = -E_y, \quad \hat{n}_{y,i0k}^{s+2} + \mu_y \hat{n}_{i0.5k}^{s+2} E_y = \hat{n}_{\bar{y},lP_yk}^{s+2} + \mu_y \hat{n}_{lP_y-0.5k}^{s+2} E_y = 0, \quad l = \overline{0, P_x}, \quad k = \overline{0, P_z}, \\ \hat{\varphi}_{z,lj0}^{s+2} &= \hat{\varphi}_{\bar{z},ljP_z}^{s+2} = -E_z, \quad \hat{n}_{z,lj0}^{s+2} + \mu_z \hat{n}_{lj0.5}^{s+2} E_z = \hat{n}_{\bar{z},ljP_z}^{s+2} + \mu_z \hat{n}_{ljP_z-0.5}^{s+2} E_z = 0, \quad l = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{0, P_y}, \end{aligned} \quad (2.6.11)$$

$$I_{lj0}^{s+2} = e^{-\frac{(x_l - 0.5L_x)^2}{a_x^2} - \frac{(y_j - 0.5L_y)^2}{a_y^2}} (1 - e^{-10\bar{t}_{m+1}}), \quad l = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{0, P_y}.$$

Третий этап ТЭИП записывается в виде:

$$\frac{\hat{N} - N}{\tau} = G - R, \quad l = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{0, P_y}, \quad k = \overline{0, P_z}, \quad (2.6.12)$$

$$\frac{\hat{n} - n}{\tau} = \kappa_x \left(n_{\bar{x}\bar{x}}^{s+2} - Z_{\bar{x}\bar{x}}(n, \varphi) \right) + \kappa_y \left(n_{\bar{y}\bar{y}}^{s+2} - Z_{\bar{y}\bar{y}}(n, \varphi) \right) + \kappa_z \left(n_{\bar{z}\bar{z}}^{s+2} - Z_{\bar{z}\bar{z}}(n, \varphi) \right) + G - R, \quad (2.6.13)$$

$$l = \overline{1, P_x - 1}, \quad j = \overline{1, P_y - 1}, \quad k = \overline{1, P_z - 1},$$

$$\Lambda \hat{\varphi} = \gamma(\hat{n} - \hat{N}), \quad l = \overline{1, P_x - 1}, \quad j = \overline{1, P_y - 1}, \quad k = \overline{1, P_z - 1}, \quad (2.6.14)$$

$$\frac{\hat{I}^{m+1} - I^{m+1}}{h_z} + \delta_0 \delta^{s+3}_{0.5} I^{m+1} = 0, \quad l = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{0, P_y}, \quad k = \overline{1, P_z}, \quad (2.6.14)$$

с граничными условиями:

$$\begin{aligned} \hat{\varphi}_{x,0jk}^{s+3} &= \hat{\varphi}_{\bar{x},P_xjk}^{s+3} = -E_x, \quad \hat{n}_{x,0jk}^{s+3} + \mu_x \hat{n}_{0.5jk}^{s+3} E_x = \hat{n}_{\bar{x},P_xjk}^{s+3} + \mu_x \hat{n}_{P_x-0.5jk}^{s+3} E_x = 0, \quad j = \overline{0, P_y}, \quad k = \overline{0, P_z}, \\ \hat{\varphi}_{y,i0k}^{s+3} &= \hat{\varphi}_{\bar{y},lP_yk}^{s+3} = -E_y, \quad \hat{n}_{y,i0k}^{s+3} + \mu_y \hat{n}_{i0.5k}^{s+3} E_y = \hat{n}_{\bar{y},lP_yk}^{s+3} + \mu_y \hat{n}_{lP_y-0.5k}^{s+3} E_y = 0, \quad l = \overline{0, P_x}, \quad k = \overline{0, P_z}, \\ \hat{\varphi}_{z,lj0}^{s+3} &= \hat{\varphi}_{\bar{z},ljP_z}^{s+3} = -E_z, \quad \hat{n}_{z,lj0}^{s+3} + \mu_z \hat{n}_{lj0.5}^{s+3} E_z = \hat{n}_{\bar{z},ljP_z}^{s+3} + \mu_z \hat{n}_{ljP_z-0.5}^{s+3} E_z = 0, \quad l = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{0, P_y}. \end{aligned} \quad (2.6.15)$$

$$I_{lj0}^{s+3} = e^{-\frac{(x_l - 0.5L_x)^2}{a_x^2} - \frac{(y_j - 0.5L_y)^2}{a_y^2}} (1 - e^{-10\bar{t}_{m+1}}), \quad l = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{0, P_y}.$$

В уравнениях (2.6.2) – (2.6.15) функции \hat{N}^{s+1} , I^{s+1} , \hat{N}^{s+2} , I^{s+2} , \hat{N}^{s+3} , I^{s+3} вычисляются явно, а \hat{n}^{s+1} , \hat{n}^{s+2} , \hat{n}^{s+3} – методом прогонки. Для вычисления $\hat{\varphi}^{s+1}$, $\hat{\varphi}^{s+2}$, $\hat{\varphi}^{s+3}$ применяется либо дополнительный итерационный процесс, либо прямой метод (подробно данный вопрос обсуждается в §2.8). Переход на следующий временной слой осуществляется после того, как удовлетворен критерий сходимости:

$$\begin{aligned} & |\hat{n}^{s+3} - \hat{n}^s| < |\hat{n}^s| \varepsilon_1 + \varepsilon_2, \quad |\hat{N}^{s+3} - \hat{N}^s| < |\hat{N}^s| \varepsilon_1 + \varepsilon_2, \quad |\hat{I}^{s+3} - \hat{I}^{s+1}| < |\hat{I}^{s+1}| \varepsilon_1 + \varepsilon_2, \\ & l = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{0, P_y}, \quad k = \overline{0, P_z}. \end{aligned} \quad (2.6.16)$$

В качестве начального приближения используются значения функций с предыдущего временного слоя:

$$\hat{n}^0 = n, \quad \hat{N}^0 = N, \quad \hat{\varphi}^0 = \varphi, \quad \hat{I}^{m+1,0} = \hat{I}^m, \quad l = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{0, P_y}, \quad k = \overline{0, P_z}. \quad (2.6.17)$$

2.6.2 Исследование консервативности на итерациях для ТЭИП

Теорема 2.6.1. ТЭИП (2.6.2) – (2.6.15) с граничными условия первого порядка аппроксимации удовлетворяет закону сохранения заряда (2.3.11) на итерациях ($\hat{Q}^{s+3} = \hat{Q}^s$).

Доказательство. Для доказательства теоремы рассмотрим зависимость инварианта (2.3.11) от времени и просуммируем слагаемые, входящие в правую часть по формулам (2.1.30).

Таким образом для первого этапа ТЭИП (2.6.2) – (2.6.5) выражение примет следующий вид:

$$\begin{aligned}
\frac{\hat{Q}-Q}{\tau} &= h_y h_z \frac{\kappa_x}{2} \sum_{j=1}^{P_x-1} \sum_{k=1}^{P_z-1} \left(\left(\hat{n}_{\bar{x},P_x j k}^{s+1} - \mu_x \hat{n}_{P_x-0.5 j k}^s \hat{\phi}_{\bar{x},P_x j k}^s \right) - \left(\hat{n}_{x,0 j k}^{s+1} - \mu_x \hat{n}_{0.5 j k}^s \hat{\phi}_{x,0 j k}^s \right) \right) + \\
&\quad \left(n_{\bar{x},P_x j k} - \mu_x n_{P_x-0.5 j k} \varphi_{\bar{x},P_x j k} \right) - \left(n_{x,0 j k} - \mu_x n_{0.5 j k} \varphi_{x,0 j k} \right) \Bigg) + \\
+h_x h_z \frac{\kappa_y}{2} \sum_{l=1}^{P_x-1} \sum_{k=1}^{P_z-1} &\left(\left(\hat{n}_{\bar{y},l P_y k}^s - \mu_y \hat{n}_{l P_y-0.5 k}^s \hat{\phi}_{\bar{y},l P_y k}^s \right) - \left(\hat{n}_{y,l 0 k}^s - \mu_y \hat{n}_{l 0.5 k}^s \hat{\phi}_{y,l 0 k}^s \right) \right) + \\
&\quad \left(n_{\bar{y},l P_y k} - \mu_y n_{l P_y-0.5 k} \varphi_{\bar{y},l P_y k} \right) - \left(n_{y,l 0 k} - \mu_y n_{l 0.5 k} \varphi_{y,l 0 k} \right) \Bigg) + \\
+h_x h_y \frac{\kappa_z}{2} \sum_{l=1}^{P_x-1} \sum_{j=1}^{P_y-1} &\left(\left(\hat{n}_{\bar{z},l j P_z}^s - \mu_z \hat{n}_{l j P_z-0.5}^s \hat{\phi}_{\bar{z},l j P_z}^s \right) - \left(\hat{n}_{z,l j 0}^s - \mu_z \hat{n}_{l j 0.5}^s \hat{\phi}_{z,l j 0}^s \right) \right) + \\
&\quad \left(n_{\bar{z},l j P_z} - \mu_z n_{l j P_z-0.5} \varphi_{\bar{z},l j P_z} \right) - \left(n_{z,l j 0} - \mu_z n_{l j 0.5} \varphi_{z,l j 0} \right) \Bigg).
\end{aligned} \tag{2.6.18}$$

Для второго этапа (2.6.7) – (2.6.10):

$$\begin{aligned}
\frac{\hat{Q}-Q}{\tau} &= h_y h_z \frac{\kappa_x}{2} \sum_{j=1}^{P_x-1} \sum_{k=1}^{P_z-1} \left(\left(\hat{n}_{\bar{x},P_x j k}^{s+1} - \mu_x \hat{n}_{P_x-0.5 j k}^s \hat{\phi}_{\bar{x},P_x j k}^s \right) - \left(\hat{n}_{x,0 j k}^{s+1} - \mu_x \hat{n}_{0.5 j k}^s \hat{\phi}_{x,0 j k}^s \right) \right) + \\
&\quad \left(n_{\bar{x},P_x j k} - \mu_x n_{P_x-0.5 j k} \varphi_{\bar{x},P_x j k} \right) - \left(n_{x,0 j k} - \mu_x n_{0.5 j k} \varphi_{x,0 j k} \right) \Bigg) + \\
+h_x h_z \frac{\kappa_y}{2} \sum_{l=1}^{P_x-1} \sum_{k=1}^{P_z-1} &\left(\left(\hat{n}_{\bar{y},l P_y k}^{s+2} - \mu_y \hat{n}_{l P_y-0.5 k}^{s+1} \hat{\phi}_{\bar{y},l P_y k}^{s+1} \right) - \left(\hat{n}_{y,l 0 k}^{s+2} - \mu_y \hat{n}_{l 0.5 k}^{s+1} \hat{\phi}_{y,l 0 k}^{s+1} \right) \right) + \\
&\quad \left(n_{\bar{y},l P_y k} - \mu_y n_{l P_y-0.5 k} \varphi_{\bar{y},l P_y k} \right) - \left(n_{y,l 0 k} - \mu_y n_{l 0.5 k} \varphi_{y,l 0 k} \right) \Bigg) + \\
+h_x h_y \frac{\kappa_z}{2} \sum_{l=1}^{P_x-1} \sum_{j=1}^{P_y-1} &\left(\left(\hat{n}_{\bar{z},l j P_z}^s - \mu_z \hat{n}_{l j P_z-0.5}^s \hat{\phi}_{\bar{z},l j P_z}^s \right) - \left(\hat{n}_{z,l j 0}^s - \mu_z \hat{n}_{l j 0.5}^s \hat{\phi}_{z,l j 0}^s \right) \right) + \\
&\quad \left(n_{\bar{z},l j P_z} - \mu_z n_{l j P_z-0.5} \varphi_{\bar{z},l j P_z} \right) - \left(n_{z,l j 0} - \mu_z n_{l j 0.5} \varphi_{z,l j 0} \right) \Bigg).
\end{aligned} \tag{2.6.19}$$

Для третьего этапа (2.6.12) – (2.6.14):

$$\begin{aligned}
\frac{\hat{Q}-Q}{\tau} &= h_y h_z \frac{\kappa_x}{2} \sum_{j=1}^{P_x-1} \sum_{k=1}^{P_z-1} \left(\left(\hat{n}_{\bar{x},P_x j k}^{s+2} - \mu_x \hat{n}_{P_x-0.5 j k}^{s+2} \hat{\phi}_{\bar{x},P_x j k}^{s+2} \right) - \left(\hat{n}_{x,0 j k}^{s+2} - \mu_x \hat{n}_{0.5 j k}^{s+2} \hat{\phi}_{x,0 j k}^{s+2} \right) \right) + \\
&\quad \left(n_{\bar{x},P_x j k} - \mu_x n_{P_x-0.5 j k} \varphi_{\bar{x},P_x j k} \right) - \left(n_{x,0 j k} - \mu_x n_{0.5 j k} \varphi_{x,0 j k} \right) \Bigg) + \\
+h_x h_z \frac{\kappa_y}{2} \sum_{l=1}^{P_x-1} \sum_{k=1}^{P_z-1} &\left(\left(\hat{n}_{\bar{y},l P_y k}^{s+2} - \mu_y \hat{n}_{l P_y-0.5 k}^{s+1} \hat{\phi}_{\bar{y},l P_y k}^{s+1} \right) - \left(\hat{n}_{y,l 0 k}^{s+2} - \mu_y \hat{n}_{l 0.5 k}^{s+1} \hat{\phi}_{y,l 0 k}^{s+1} \right) \right) + \\
&\quad \left(n_{\bar{y},l P_y k} - \mu_y n_{l P_y-0.5 k} \varphi_{\bar{y},l P_y k} \right) - \left(n_{y,l 0 k} - \mu_y n_{l 0.5 k} \varphi_{y,l 0 k} \right) \Bigg) + \\
+h_x h_y \frac{\kappa_z}{2} \sum_{l=1}^{P_x-1} \sum_{j=1}^{P_y-1} &\left(\left(\hat{n}_{\bar{z},l j P_z}^{s+3} - \mu_z \hat{n}_{l j P_z-0.5}^{s+2} \hat{\phi}_{\bar{z},l j P_z}^{s+2} \right) - \left(\hat{n}_{z,l j 0}^{s+3} - \mu_z \hat{n}_{l j 0.5}^{s+2} \hat{\phi}_{z,l j 0}^{s+2} \right) \right) + \\
&\quad \left(n_{\bar{z},l j P_z} - \mu_z n_{l j P_z-0.5} \varphi_{\bar{z},l j P_z} \right) - \left(n_{z,l j 0} - \mu_z n_{l j 0.5} \varphi_{z,l j 0} \right) \Bigg).
\end{aligned} \tag{2.6.20}$$

Из граничного условия (2.6.15) следует, что

$$\begin{aligned}
(n_x + \mu_x n_{i+0.5} E_x) \Big|_{i=0} &= (n_{\bar{x}} + \mu_x n_{i-0.5} E_x) \Big|_{i=P_x} = 0, \quad j = \overline{0, P_y}, \quad k = \overline{0, P_z}, \\
(n_y + \mu_y n_{j+0.5} E_y) \Big|_{j=0} &= (n_{\bar{y}} + \mu_y n_{j-0.5} E_y) \Big|_{j=P_y} = 0, \quad i = \overline{0, P_x}, \quad k = \overline{0, P_z}, \\
\left(\hat{n}_y + \mu_y \hat{n}_{j+0.5} E_y \right) \Big|_{j=0} &= \left(\hat{n}_{\bar{y}} + \mu_y \hat{n}_{j-0.5} E_y \right) \Big|_{j=P_y} = 0, \quad i = \overline{0, P_x}, \quad k = \overline{0, P_z}.
\end{aligned} \tag{2.6.21}$$

С учетом условий (2.6.6), (2.6.11), (2.6.15) и (2.6.21), выражения (2.6.18) – (2.6.20) записываются в следующем виде:

$$\frac{\hat{Q}^{s+1} - Q}{\tau} = h_x h_y \frac{\kappa_z}{2} \sum_{l=1}^{P_x-1} \sum_{j=1}^{P_y-1} \left(\left(\hat{n}_{\bar{z}, ljP_z} + \mu_z \hat{n}_{ljP_z-0.5} E_z \right) - \left(\hat{n}_{z, lj0} + \mu_z \hat{n}_{lj0.5} E_z \right) + \right. \\
\left. + \left(n_{\bar{z}, ljP_z} + \mu_z n_{ljP_z-0.5} E_z \right) - \left(n_{z, lj0} + \mu_z n_{lj0.5} E_z \right) \right), \tag{2.6.22}$$

$$\frac{\hat{Q}^{s+2} - Q}{\tau} = h_x h_y \frac{\kappa_z}{2} \sum_{l=1}^{P_x-1} \sum_{j=1}^{P_y-1} \left(\left(\hat{n}_{\bar{z}, ljP_z} + \mu_z \hat{n}_{ljP_z-0.5} E_z \right) - \left(\hat{n}_{z, lj0} + \mu_z \hat{n}_{lj0.5} E_z \right) + \right. \\
\left. + \left(n_{\bar{z}, ljP_z} + \mu_z n_{ljP_z-0.5} E_z \right) - \left(n_{z, lj0} + \mu_z n_{lj0.5} E_z \right) \right), \tag{2.6.23}$$

$$\frac{\hat{Q}^{s+3} - Q}{\tau} = h_x h_y \frac{\kappa_z}{2} \sum_{l=1}^{P_x-1} \sum_{j=1}^{P_y-1} \left(\left(n_{\bar{z}, ljP_z} + \mu_z n_{ljP_z-0.5} E_z \right) - \left(n_{z, lj0} + \mu_z n_{lj0.5} E_z \right) \right). \tag{2.6.24}$$

Так как число итерций для ТЭИП всегда кратно трем, то из (2.6.24) следует:

$$\frac{\hat{Q}^s - Q}{\tau} = h_x h_y \frac{\kappa_z}{2} \sum_{l=1}^{P_x-1} \sum_{j=1}^{P_y-1} \left(\left(n_{\bar{z}, ljP_z} + \mu_z n_{ljP_z-0.5} E_z \right) - \left(n_{z, lj0} + \mu_z n_{lj0.5} E_z \right) \right). \tag{2.6.25}$$

Если вычесть между собой (2.6.22) – (2.6.25), то получатся следующие соотношения:

$$\frac{\hat{Q}^{s+1} - \hat{Q}^s}{\tau} = h_x h_y \frac{\kappa_z}{2} \sum_{l=1}^{P_x-1} \sum_{j=1}^{P_y-1} \left(\left(\hat{n}_{\bar{z}, ljP_z} + \mu_z \hat{n}_{ljP_z-0.5} E_z \right) - \left(\hat{n}_{z, lj0} + \mu_z \hat{n}_{lj0.5} E_z \right) \right), \tag{2.6.26}$$

$$\frac{\hat{Q}^{s+2} - \hat{Q}^{s+1}}{\tau} = 0, \tag{2.6.27}$$

$$\frac{\hat{Q}^{s+3} - \hat{Q}^{s+2}}{\tau} = -h_x h_y \frac{\kappa_z}{2} \sum_{l=1}^{P_x-1} \sum_{j=1}^{P_y-1} \left(\left(\hat{n}_{\bar{z}, ljP_z} + \mu_z \hat{n}_{ljP_z-0.5} E_z \right) - \left(\hat{n}_{z, lj0} + \mu_z \hat{n}_{lj0.5} E_z \right) \right), \tag{2.6.28}$$

$$\frac{\hat{Q}^{s+3} - \hat{Q}^s}{\tau} = 0. \tag{2.6.29}$$

Из (2.6.26) – (2.6.29) следует, что после первого этапа ТЭИП возникают небольшие изменения инварианта (2.6.26), на 2 этапе инвариант не изменяется (2.6.27) и на 3 происходит компенсация изменений, полученных на 1 этапе (2.6.28). В результате чего после выполнения всех этапов ТЭИП итоговое изменение инварианта равно нулю (2.6.29) и, следовательно, схема (2.6.2) – (2.6.15) консервативна на итерациях. *Конец доказательства.*

2.6.3. Модифицированный метод стабилизирующей поправки для 3D задачи взаимодействия оптического импульса с полупроводником

Устойчивым и имеющим второй порядок аппроксимации методом решения 3D эллиптических уравнений является метод стабилизирующей поправки [120-122]. В операторном виде для задачи вида

$$\frac{\partial u}{\partial t} + Au = f(t), \quad A = A_x + A_y + A_z \quad (2.6.30)$$

данный метод записывается как:

$$\left(E + \frac{\tau}{2} A_x\right) \left(E + \frac{\tau}{2} A_y\right) \left(E + \frac{\tau}{2} A_z\right) \frac{u^{m+1} - u^m}{\tau} + Au = f(t_{m+1/2}). \quad (2.6.31)$$

Схема реализации алгоритма имеет следующий вид [122]:

$$\begin{aligned} \left(E + \frac{\tau}{2} A_x\right) \xi^{m+1/3} &= -Au^m + f, \\ \left(E + \frac{\tau}{2} A_y\right) \xi^{m+2/3} &= \xi^{m+1/3}, \\ \left(E + \frac{\tau}{2} A_z\right) \xi^{m+1} &= \xi^{m+2/3}, \\ u^{m+1} &= u^m + \tau \xi^{m+1}, \end{aligned} \quad (2.6.32)$$

где ξ – некая вспомогательная функция.

В случае достаточной гладкости решения метод стабилизации имеет второй порядок точности по времени [122].

Чтобы воспользоваться данным методом для решения дифференциального уравнения (1.2.2) перепишем его в следующем виде:

$$\begin{aligned} \frac{\partial n}{\partial t} &= \kappa_x \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} + \kappa_y \frac{\partial^2 n}{\partial y^2} + \kappa_z \frac{\partial^2 n}{\partial z^2} + f, \\ f &= -\kappa_x \mu_x \frac{\partial}{\partial x} \left(n \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) - \kappa_y \mu_y \frac{\partial}{\partial y} \left(n \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) - \kappa_z \mu_z \frac{\partial}{\partial z} \left(n \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right) + G - R. \end{aligned} \quad (2.6.33)$$

Тогда на сетке (2.3.1) метод стабилизации (2.6.32) записывается как:

$$\begin{aligned} \xi^{m+1/3} - \frac{\tau}{2} \kappa_x \xi_{\bar{x}\bar{x}}^{m+1/3} &= \kappa_x n_{\bar{x}\bar{x}} + \kappa_y n_{\bar{y}\bar{y}} + \kappa_z n_{\bar{z}\bar{z}} + f, \\ \xi^{m+2/3} - \frac{\tau}{2} \kappa_y \xi_{\bar{y}\bar{y}}^{m+2/3} &= \xi^{m+1/3}, \\ \xi^{m+1} - \frac{\tau}{2} \kappa_z \xi_{\bar{z}\bar{z}}^{m+1} &= \xi^{m+2/3}, \\ \hat{n} &= n + \tau \xi^{m+1}. \end{aligned} \quad (2.6.34)$$

Однако в представлении (2.6.34) остается вопрос как аппроксимировать f так, чтобы схема имела второй порядок по времени?

Для ответа на этот вопрос, в дополнение к сеткам (2.1.1), введем сетки с промежуточными

временными слоями: $\bar{\bar{\Omega}} = \omega_x \times \omega_y \times \omega_z \times \bar{\omega}_t$, $\bar{\bar{\bar{\Omega}}} = \omega_x \times \omega_y \times \omega_z \times \bar{\bar{\omega}}_t$, $\bar{\Omega}' = \omega_x \times \omega_y \times \omega'_z \times \omega_t$,

$\bar{\bar{\Omega}}' = \omega_x \times \omega_y \times \omega'_z \times \bar{\omega}_t$ и $\bar{\bar{\bar{\Omega}}}' = \omega_x \times \omega_y \times \omega'_z \times \bar{\bar{\omega}}_t$:

$$\begin{aligned} \omega'_z &= \left\{ z'_k = (k - 0.5)h_z, k = \overline{0, P_z + 1}, h_z = L_z / P_z \right\}, \\ \bar{\omega}_t &= \left\{ \bar{t}_m = (m + 1/3)\tau, m = \overline{0, P_t - 1}, \tau = L_t / P_t \right\}, \\ \bar{\bar{\omega}}_t &= \left\{ \bar{\bar{t}}_m = (m + 2/3)\tau, m = \overline{0, P_t - 1}, \tau = L_t / P_t \right\}. \end{aligned} \quad (2.6.35)$$

Определим на $\bar{\bar{\Omega}}$ сеточные функции $\bar{n}_h, \bar{N}_h, \bar{\varphi}_h$, на $\bar{\bar{\bar{\Omega}}}$ сеточные функции $\bar{\bar{n}}_h, \bar{\bar{N}}_h, \bar{\bar{\varphi}}_h$, на $\bar{\Omega}'$ сеточные функцию I_h , на $\bar{\bar{\bar{\Omega}}}'$ сеточные функцию \bar{I}_h , и на $\bar{\bar{\bar{\Omega}}}'$ сеточные функцию $\bar{\bar{I}}_h$ следующим образом:

$$\begin{aligned} n_{ijk}^m &= n(x_i, y_j, z_k, t_m), \quad N_{ijk}^m = N(x_i, y_j, z_k, t_m), \quad \varphi_{ijk}^m = \varphi(x_i, y_j, z_k, t_m), \quad I_{ijk}^m = I(x_i, y_j, z'_k, t_m), \\ \bar{n}_{ijk}^m &= n(x_i, y_j, z_k, \bar{t}_m), \quad \bar{N}_{ijk}^m = N(x_i, y_j, z_k, \bar{t}_m), \quad \bar{\varphi}_{ijk}^m = \varphi(x_i, y_j, z_k, \bar{t}_m), \quad \bar{I}_{ijk}^m = I(x_i, y_j, z'_k, \bar{t}_m), \\ \bar{\bar{n}}_{ijk}^m &= n(x_i, y_j, z_k, \bar{\bar{t}}_m), \quad \bar{\bar{N}}_{ijk}^m = N(x_i, y_j, z_k, \bar{\bar{t}}_m), \quad \bar{\bar{\varphi}}_{ijk}^m = \varphi(x_i, y_j, z_k, \bar{\bar{t}}_m), \quad \bar{\bar{I}}_{ijk}^m = I(x_i, y_j, z'_k, \bar{\bar{t}}_m). \end{aligned}$$

Сеточные функции $G, R, \delta, \bar{G}, \bar{R}, \bar{\delta}, \bar{\bar{G}}, \bar{\bar{R}}, \bar{\bar{\delta}}$ определим следующим образом:

$$\begin{aligned}
G &= G(n, N, \varphi, I_{k+0.5}), \quad R = R(n, N), \quad \delta = \delta(n, N, \varphi), \\
\bar{G} &= G(\bar{n}, \bar{N}, \bar{\varphi}, \bar{I}_{k+0.5}), \quad \bar{R} = R(\bar{n}, \bar{N}), \quad \bar{\delta} = \delta(\bar{n}, \bar{N}, \bar{\varphi}), \\
\bar{\bar{G}} &= G(\bar{\bar{n}}, \bar{\bar{N}}, \bar{\bar{\varphi}}, \bar{\bar{I}}_{k+0.5}), \quad \bar{\bar{R}} = R(\bar{\bar{n}}, \bar{\bar{N}}), \quad \bar{\bar{\delta}} = \delta(\bar{\bar{n}}, \bar{\bar{N}}, \bar{\bar{\varphi}}).
\end{aligned} \tag{2.6.36}$$

Для записи разностных уравнений будем использовать безиндексные обозначения (2.1.2) и (2.2.2) применительно к функциям $n, N, \varphi, I, \bar{n}, \bar{N}, \bar{\varphi}, \bar{I}, \bar{\bar{n}}, \bar{\bar{N}}, \bar{\bar{\varphi}}, \bar{\bar{I}}$.

При этом, так как уравнение (2.6.33) является частью системы уравнений с нелинейной обратной связью, дополнительно потребуем, чтобы полученная для него разностная схема позволяла найти значения функций на промежуточных слоях (2.6.35) для их последующего использования в других уравнениях системы. Для этого произведем замену для системы (2.6.34) следующим образом:

$$\xi^{m+1} = \frac{\hat{n} - n}{\tau}, \quad \xi^{m+1/3} = \frac{\bar{n} - n}{\tau/3}, \quad \xi^{m+2/3} = \frac{\bar{\bar{n}} - n}{2\tau/3}. \tag{2.6.37}$$

Тогда:

$$\begin{aligned}
\frac{\bar{n} - n}{\tau/3} - \frac{3}{2} \kappa_x (\bar{n}_{xx} - n_{xx}) &= \kappa_x n_{xx} + \kappa_y n_{yy} + \kappa_z n_{zz} + f_\tau, \\
\frac{\bar{\bar{n}} - n}{2\tau/3} - \frac{3}{4} \kappa_y (\bar{\bar{n}}_{yy} - \bar{n}_{yy}) &= \frac{\bar{n} - n}{\tau/3}, \\
\frac{\hat{n} - n}{\tau} - \frac{1}{2} \kappa_z (\hat{n}_{zz} - n_{zz}) &= \frac{\bar{\bar{n}} - n}{2\tau/3},
\end{aligned} \tag{2.6.38}$$

где f_τ – некая аппроксимация нелинейной части уравнения (2.6.33).

Замечание. Если вместо замены (2.6.37) воспользоваться заменой

$$\xi^{m+1} = \frac{\hat{n} - n}{\tau}, \quad \xi^{m+1/3} = \frac{\bar{\chi} - n}{\tau}, \quad \xi^{m+2/3} = \frac{\bar{\bar{\chi}} - n}{\tau},$$

где $\bar{\chi}$ и $\bar{\bar{\chi}}$ – некие вспомогательные функции, то получим метод Дугласа второго порядка аппроксимации [120].

Подставив 1 уравнение (2.6.38) в правую часть 2-го и 2 в правую часть 3, система (2.6.38) примет следующий вид:

$$\begin{aligned}
\frac{\bar{n} - n}{\tau/3} &= \frac{3}{2} \kappa_x \bar{n}_{\bar{x}\bar{x}} - \frac{1}{2} \kappa_x n_{\bar{x}\bar{x}} + \kappa_y n_{\bar{y}\bar{y}} + \kappa_z n_{\bar{z}\bar{z}} + f_\tau, \\
\frac{\bar{\bar{n}} - \bar{n}}{\tau/3} &= \frac{3}{2} \kappa_x \bar{n}_{\bar{x}\bar{x}} - \frac{1}{2} \kappa_x n_{\bar{x}\bar{x}} + \frac{3}{2} \kappa_y \bar{\bar{n}}_{\bar{y}\bar{y}} - \frac{1}{2} \kappa_y n_{\bar{y}\bar{y}} + \kappa_z n_{\bar{z}\bar{z}} + f_\tau, \\
\frac{\hat{n} - \bar{\bar{n}}}{\tau/3} &= \frac{3}{2} \kappa_x \bar{n}_{\bar{x}\bar{x}} - \frac{1}{2} \kappa_x n_{\bar{x}\bar{x}} + \frac{3}{4} \kappa_y \bar{\bar{n}}_{\bar{y}\bar{y}} + \frac{1}{4} \kappa_y n_{\bar{y}\bar{y}} + \frac{3}{2} \kappa_z \hat{n}_{\bar{z}\bar{z}} - \frac{1}{2} \kappa_z n_{\bar{z}\bar{z}} + f_\tau.
\end{aligned} \tag{2.6.39}$$

Потребуем, чтобы разностная схема (2.6.39) обладала суммарной аппроксимацией второго порядка по времени относительно момента $t_{m+1/2}$. Для этого представим слагаемые, входящие в правую часть (2.6.39) в следующем виде:

$$\begin{aligned}
f_1 &= a_1 f + d_1 f_x, \quad f = -\kappa_y Z_{\bar{y}\bar{y}}(n, \varphi) - \kappa_z Z_{\bar{z}\bar{z}}(n, \varphi) + G - R, \quad f_x = -\kappa_x Z_{\bar{x}\bar{x}}(n, \varphi), \\
f_2 &= a_2 f + b_2 \bar{f} + d_2 f_x + e_2 \bar{f}_x, \quad \bar{f} = -\kappa_y Z_{\bar{y}\bar{y}}(\bar{n}, \bar{\varphi}) - Z_{\bar{z}\bar{z}}(\bar{n}, \bar{\varphi}) + \bar{G} - \bar{R}, \quad \bar{f}_x = -\kappa_x Z_{\bar{x}\bar{x}}(\bar{n}, \bar{\varphi}), \\
f_3 &= a_3 f + b_3 \bar{\bar{f}} + c_3 \bar{\bar{f}}_x + d_3 f_x + e_3 \bar{f}_x, \quad \bar{\bar{f}} = -\kappa_y Z_{\bar{y}\bar{y}}(\bar{\bar{n}}, \bar{\bar{\varphi}}) - \kappa_z Z_{\bar{z}\bar{z}}(\bar{\bar{n}}, \bar{\bar{\varphi}}) + \bar{\bar{G}} - \bar{\bar{R}},
\end{aligned} \tag{2.6.40}$$

где f_1, f_2, f_3 – последнее слагаемое 1, 2 и 3 уравнения (2.6.39) соответственно.

Замечание. Так как в линейной части (2.6.39) нет слагаемого вида $\bar{\bar{n}}_{\bar{x}\bar{x}}$, то из (2.6.40) соответственно исключены слагаемые вида $Z_{\bar{x}\bar{x}}(\bar{\bar{n}}, \bar{\bar{\varphi}})$, из-за чего коэффициенты перед операторами $Z_{\bar{x}\bar{x}}$ отличаются от остальных.

Как известно, $u(t_{m+1/2}) = \frac{3}{8}u(t_{m+2/3}) + \frac{3}{4}u(t_{m+1/3}) - \frac{1}{8}u(t_m) + O(\tau^2)$ – данное разложение удобно тем, что содержит значение функции с нижнего и промежуточных слоев, но при этом отсутствует значение на верхнем. Альтернативным разложением является $u(t_{m+1/2}) = \frac{3}{2}u(t_{m+1/3}) - \frac{1}{2}u(t_m) + O(\tau^2)$ – в данном случае для аппроксимации используются только значения с нижнего и первого промежуточного слоя. Таким образом представление (2.6.40) будет иметь суммарную аппроксимацию 2 порядок по времени если:

$$\begin{aligned}
\frac{a_1 + a_2 + a_3}{3} &= -\frac{1}{8}, \\
\frac{b_2 + b_3}{3} &= \frac{3}{4}, \\
\frac{c_3}{3} &= \frac{3}{8}, \\
\frac{d_1 + d_2 + d_3}{3} &= -\frac{1}{2}, \\
\frac{e_2 + e_3}{3} &= \frac{3}{2}.
\end{aligned} \tag{2.6.41}$$

В дополнение к (2.6.41) так же потребуем, чтобы сумма весов для каждого из операторов Z равнялась 1:

$$\begin{aligned}
 a_1 &= 1, \\
 a_2 + b_2 &= 1, \\
 a_3 + b_3 + c_3 &= 1, \\
 d_1 &= 1, \\
 d_2 + e_2 &= 1, \\
 d_3 + e_3 &= 1.
 \end{aligned} \tag{2.6.42}$$

Условия (2.6.41) – (2.6.42) образуют систему из 9 линейных уравнений с 11 неизвестными:

$$\begin{aligned}
 a_1 &= 1, \quad a_2 = -\frac{5}{4} + b_3, \quad a_3 = -\frac{1}{8} - b_3, \quad b_2 = \frac{9}{4} - b_3, \quad c_3 = \frac{9}{8}, \\
 d_1 &= 1, \quad d_2 = -\frac{7}{2} + e_3, \quad d_3 = 1 - e_3, \quad e_2 = \frac{9}{2} - e_3.
 \end{aligned} \tag{2.6.43}$$

Пусть $b_3 = \frac{9}{8}$, $e_3 = \frac{9}{4}$, тогда:

$$\begin{aligned}
 a_1 &= 1, \quad a_2 = -\frac{1}{8}, \quad a_3 = -\frac{5}{4}, \quad b_2 = -\frac{9}{4}, \quad b_3 = \frac{9}{8}, \quad c_3 = \frac{9}{8}, \\
 d_1 &= 1, \quad d_2 = -\frac{5}{4}, \quad d_3 = -\frac{5}{4}, \quad e_2 = \frac{9}{4}, \quad e_3 = \frac{9}{4}.
 \end{aligned} \tag{2.6.44}$$

Подставим (2.6.44) в (2.6.40):

$$\begin{aligned}
 f_1 &= -\kappa_x Z_{\bar{x}\bar{x}}(n, \varphi) - \kappa_y Z_{\bar{y}\bar{y}}(n, \varphi) - \kappa_z Z_{\bar{z}\bar{z}}(n, \varphi) + G - R, \\
 f_2 &= -\kappa_x \left(\frac{9}{4} Z_{\bar{x}\bar{x}}(\bar{n}, \bar{\varphi}) - \frac{5}{4} Z_{\bar{x}\bar{x}}(n, \varphi) \right) - \kappa_y \left(\frac{9}{8} Z_{\bar{y}\bar{y}}(\bar{n}, \bar{\varphi}) - \frac{1}{8} Z_{\bar{y}\bar{y}}(n, \varphi) \right) - \\
 &\quad - \kappa_z \left(\frac{9}{8} Z_{\bar{z}\bar{z}}(\bar{n}, \bar{\varphi}) - \frac{1}{8} Z_{\bar{z}\bar{z}}(n, \varphi) \right) + \frac{9}{8} (\bar{G} - \bar{R}) - \frac{1}{8} (G - R), \\
 f_3 &= -\kappa_x \left(\frac{9}{4} Z_{\bar{x}\bar{x}}(\bar{n}, \bar{\varphi}) - \frac{5}{4} Z_{\bar{x}\bar{x}}(n, \varphi) \right) + \\
 &\quad - \kappa_y \left(\frac{9}{8} Z_{\bar{y}\bar{y}}(\bar{n}, \bar{\varphi}) + \frac{9}{8} Z_{\bar{y}\bar{y}}(\bar{n}, \bar{\varphi}) - \frac{5}{4} Z_{\bar{y}\bar{y}}(n, \varphi) \right) - \\
 &\quad - \kappa_z \left(\frac{9}{8} Z_{\bar{z}\bar{z}}(\bar{n}, \bar{\varphi}) + \frac{9}{8} Z_{\bar{z}\bar{z}}(\bar{n}, \bar{\varphi}) - \frac{5}{4} Z_{\bar{z}\bar{z}}(n, \varphi) \right) + \\
 &\quad + \frac{9}{8} (\bar{G} - \bar{R}) + \frac{9}{8} (\bar{G} - \bar{R}) - \frac{5}{4} (G - R).
 \end{aligned} \tag{2.6.45}$$

Таким образом, модифицированный метод стабилизирующей поправки для задачи (1.2.1) – (1.2.6) реализуются следующим образом:

1) Вычисляем значения функций на первом промежуточном слое \bar{n} , \bar{N} , $\bar{\varphi}$, \bar{I} , решая систему

$$\begin{aligned} \frac{\bar{N} - N}{\tau/3} &= G - R, \quad l = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{0, P_y}, \quad k = \overline{0, P_z}, \\ \frac{\bar{n} - n}{\tau/3} &= \kappa_x \left(\frac{3}{2} \bar{n}_{\bar{x}\bar{x}} - \frac{1}{2} n_{\bar{x}\bar{x}} - Z_{\bar{x}\bar{x}}(n, \varphi) \right) + \kappa_y \left(n_{\bar{y}\bar{y}} - Z_{\bar{y}\bar{y}}(n, \varphi) \right) + \\ &+ \kappa_z \left(n_{\bar{z}\bar{z}} - Z_{\bar{z}\bar{z}}(n, \varphi) \right) + G - R, \quad l = \overline{1, P_x - 1}, \quad j = \overline{1, P_y - 1}, \quad k = \overline{1, P_z - 1}, \\ \Lambda \bar{\varphi} &= \gamma (\bar{n} - \bar{N}), \quad l = \overline{1, P_x - 1}, \quad j = \overline{1, P_y - 1}, \quad k = \overline{1, P_z - 1}, \\ \bar{I}_z + \delta_0 \bar{\delta} \bar{I}_{k+0.5} &= 0, \quad l = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{0, P_y}, \quad k = \overline{1, P_z}, \end{aligned} \quad (2.6.46)$$

с граничными условиями:

$$\begin{aligned} \bar{\varphi}_{x,0jk} &= \bar{\varphi}_{\bar{x},P_xjk} = -E_x, \quad \bar{n}_{x,0jk} + \mu_x n_{0.5jk} E_x = \bar{n}_{\bar{x},P_xjk} + \mu_x n_{P_x-0.5jk} E_x = 0, \quad j = \overline{0, P_y}, \quad k = \overline{0, P_z}, \\ \bar{\varphi}_{y,l0k} &= \bar{\varphi}_{\bar{y},lP_yk} = -E_y, \quad \bar{n}_{y,l0k} + \mu_y \bar{n}_{l0.5k} E_y = \bar{n}_{\bar{y},lP_yk} + \mu_y \bar{n}_{lP_y-0.5k} E_y = 0, \quad l = \overline{0, P_x}, \quad k = \overline{0, P_z}, \\ \bar{\varphi}_{z,lj0} &= \bar{\varphi}_{\bar{z},ljP_z} = -E_z, \quad \bar{n}_{z,lj0} + \mu_z \bar{n}_{lj0.5} E_z = \bar{n}_{\bar{z},ljP_z} + \mu_z \bar{n}_{ljP_z-0.5} E_z = 0, \quad l = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{0, P_y}. \\ \bar{I}_{lj0} &= e^{-\frac{(x_l-0.5L_x)^2}{a_x^2}} e^{-\frac{(y_j-0.5L_y)^2}{a_y^2}} (1 - e^{-10\bar{I}_m}), \quad l = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{0, P_y}. \end{aligned} \quad (2.6.47)$$

2) Вычисляем значения функций на втором промежуточном слое $\bar{\bar{n}}$, $\bar{\bar{N}}$, $\bar{\bar{\varphi}}$, $\bar{\bar{I}}$, решая систему

$$\begin{aligned} \frac{\bar{\bar{N}} - \bar{N}}{\tau/3} &= \frac{9}{8} (\bar{G} - \bar{R}) - \frac{1}{8} (G - R), \quad l = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{0, P_y}, \quad k = \overline{0, P_z}, \\ \frac{\bar{\bar{n}} - \bar{n}}{\tau/3} &= \kappa_x \left(\frac{3}{2} \bar{\bar{n}}_{\bar{x}\bar{x}} - \frac{1}{2} n_{\bar{x}\bar{x}} - \frac{9}{4} Z_{\bar{x}\bar{x}}(\bar{n}, \bar{\varphi}) + \frac{5}{4} Z_{\bar{x}\bar{x}}(n, \varphi) \right) + \\ &+ \kappa_y \left(\frac{3}{2} \bar{\bar{n}}_{\bar{y}\bar{y}} - \frac{1}{2} n_{\bar{y}\bar{y}} - \frac{9}{8} Z_{\bar{y}\bar{y}}(\bar{n}, \bar{\varphi}) + \frac{1}{8} Z_{\bar{y}\bar{y}}(n, \varphi) \right) + \\ &+ \kappa_z \left(n_{\bar{z}\bar{z}} - \frac{9}{8} Z_{\bar{z}\bar{z}}(\bar{n}, \bar{\varphi}) + \frac{1}{8} Z_{\bar{z}\bar{z}}(n, \varphi) \right) + \\ &+ \frac{9}{8} (\bar{G} - \bar{R}) - \frac{1}{8} (G - R), \quad l = \overline{1, P_x - 1}, \quad j = \overline{1, P_y - 1}, \quad k = \overline{1, P_z - 1}, \\ \Lambda \bar{\bar{\varphi}} &= \gamma (\bar{\bar{n}} - \bar{\bar{N}}), \quad l = \overline{1, P_x - 1}, \quad j = \overline{1, P_y - 1}, \quad k = \overline{1, P_z - 1}, \\ \bar{\bar{I}}_z + \delta_0 \bar{\bar{\delta}} \bar{\bar{I}}_{k+0.5} &= 0, \quad l = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{0, P_y}, \quad k = \overline{1, P_z}, \end{aligned} \quad (2.6.48)$$

с граничными условиями:

$$\begin{aligned}
\bar{\varphi}_{x,0jk} &= \bar{\varphi}_{\bar{x},P_xjk} = -E_x, \quad \bar{n}_{x,0jk} + \mu_x \bar{n}_{0.5jk} E_x = \bar{n}_{\bar{x},P_xjk} + \mu_x \bar{n}_{P_x-0.5jk} E_x = 0, \quad j = \overline{0, P_y}, \quad k = \overline{0, P_z}, \\
\bar{\varphi}_{y,l0k} &= \bar{\varphi}_{\bar{y},lP_yk} = -E_y, \quad \bar{n}_{y,l0k} + \mu_y \bar{n}_{l0.5k} E_y = \bar{n}_{\bar{y},lP_yk} + \mu_y \bar{n}_{lP_y-0.5k} E_y = 0, \quad l = \overline{0, P_x}, \quad k = \overline{0, P_z}, \\
\bar{\varphi}_{z,lj0} &= \bar{\varphi}_{\bar{z},ljP_z} = -E_z, \quad \bar{n}_{z,lj0} + \mu_z \bar{n}_{lj0.5} E_z = \bar{n}_{\bar{z},ljP_z} + \mu_z \bar{n}_{ljP_z-0.5} E_z = 0, \quad l = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{0, P_y}. \\
\bar{I}_{lj0} &= e^{-\frac{(x_l-0.5L_x)^2}{a_x^2}} e^{-\frac{(y_j-0.5L_y)^2}{a_y^2}} \left(1 - e^{-10\bar{t}_m}\right), \quad l = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{0, P_y}.
\end{aligned} \tag{2.6.49}$$

3) Находим значения функций на верхнем слое \hat{n} , \hat{N} , $\hat{\varphi}$, \hat{I} , решая систему:

$$\begin{aligned}
\frac{\hat{N} - \bar{N}}{\tau/3} &= \frac{9}{8}(\bar{G} - \bar{R}) + \frac{9}{8}(\bar{G} - \bar{R}) - \frac{5}{4}(G - R), \quad l = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{0, P_y}, \quad k = \overline{0, P_z}, \\
\frac{\hat{n} - \bar{n}}{\tau/3} &= \kappa_x \left(\frac{3}{2} \bar{n}_{\bar{x}\bar{x}} - \frac{1}{2} n_{\bar{x}\bar{x}} - \frac{9}{4} Z_{\bar{x}\bar{x}}(\bar{n}, \bar{\varphi}) + \frac{5}{4} Z_{\bar{x}\bar{x}}(n, \varphi) \right) + \\
&+ \kappa_y \left(\frac{3}{4} \bar{n}_{\bar{y}\bar{y}} + \frac{1}{4} n_{\bar{y}\bar{y}} - \frac{9}{8} Z_{\bar{y}\bar{y}}(\bar{n}, \bar{\varphi}) - \frac{9}{8} Z_{\bar{y}\bar{y}}(\bar{n}, \bar{\varphi}) + \frac{5}{4} Z_{\bar{y}\bar{y}}(n, \varphi) \right) \\
&+ \kappa_z \left(\frac{3}{2} \hat{n}_{\bar{z}\bar{z}} - \frac{1}{2} n_{\bar{z}\bar{z}} - \frac{9}{8} Z_{\bar{z}\bar{z}}(\bar{n}, \bar{\varphi}) - \frac{9}{8} Z_{\bar{z}\bar{z}}(\bar{n}, \bar{\varphi}) + \frac{5}{4} Z_{\bar{z}\bar{z}}(n, \varphi) \right) + \\
&+ \frac{9}{8}(\bar{G} - \bar{R}) + \frac{9}{8}(\bar{G} - \bar{R}) - \frac{5}{4}(G - R), \quad l = \overline{1, P_x - 1}, \quad j = \overline{1, P_y - 1}, \quad k = \overline{1, P_z - 1}, \\
\Lambda \hat{\varphi} &= \gamma(\hat{n} - \hat{N}), \quad l = \overline{1, P_x - 1}, \quad j = \overline{1, P_y - 1}, \quad k = \overline{1, P_z - 1}, \\
\hat{I}_z + \delta_0 \hat{\delta} \hat{I}_{k+0.5} &= 0, \quad l = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{0, P_y}, \quad k = \overline{1, P_z}.
\end{aligned} \tag{2.6.50}$$

с граничными условиями:

$$\begin{aligned}
\hat{\varphi}_{x,0jk} &= \hat{\varphi}_{\bar{x},P_xjk} = -E_x, \quad \hat{n}_{x,0jk} + \mu_x \hat{n}_{0.5jk} E_x = \hat{n}_{\bar{x},P_xjk} + \mu_x \hat{n}_{P_x-0.5jk} E_x = 0, \quad j = \overline{0, P_y}, \quad k = \overline{0, P_z}, \\
\hat{\varphi}_{y,l0k} &= \hat{\varphi}_{\bar{y},lP_yk} = -E_y, \quad \hat{n}_{y,l0k} + \mu_y \hat{n}_{l0.5k} E_y = \hat{n}_{\bar{y},lP_yk} + \mu_y \hat{n}_{lP_y-0.5k} E_y = 0, \quad l = \overline{0, P_x}, \quad k = \overline{0, P_z}, \\
\hat{\varphi}_{z,lj0} &= \hat{\varphi}_{\bar{z},ljP_z} = -E_z, \quad \hat{n}_{z,lj0} + \mu_z \bar{n}_{lj0.5} E_z = \hat{n}_{\bar{z},ljP_z} + \mu_z \bar{n}_{ljP_z-0.5} E_z = 0, \quad l = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{0, P_y}, \\
\hat{I}_{lj0} &= e^{-\frac{(x_l-0.5L_x)^2}{a_x^2}} e^{-\frac{(y_j-0.5L_y)^2}{a_y^2}} \left(1 - e^{-10\bar{t}_{m+1}}\right), \quad l = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{0, P_y}.
\end{aligned} \tag{2.6.51}$$

Следствие 2.6.1. Разностная схема (2.6.46), (2.6.48), (2.6.50) аппроксимирует дифференциальную задачу (1.1.1) – (1.1.4) со вторым порядком по времени и пространству относительно точки $(x_l, y_j, t_m + \tau/2)$. Граничные условия (2.6.47), (2.6.49), (2.6.51) аппроксимируют условия (1.2.5), (1.2.6) со 2 порядком по времени, если заданы однородные граничные условия ($E_x = 0, E_y = 0, E_z = 0$).

Теорема 2.6.2. Если для разностной схемы (2.6.46) – (2.6.51) заданы однородные граничные условия ($E_x = 0, E_y = 0, E_z = 0$), то она удовлетворяет закону сохранения заряда (2.3.11).

Доказательство. Для построения инварианта (2.3.11) для разностной схемы (2.6.46) – (2.6.51) просуммируем входящие в нее уравнения следующим образом:

$$\begin{aligned}
\frac{\hat{n} - n}{\tau/3} - \frac{\hat{N} - N}{\tau/3} &= \kappa_x \left(\frac{3}{2} \bar{n}_{\bar{x}\bar{x}} - \frac{1}{2} n_{\bar{x}\bar{x}} - Z_{\bar{x}\bar{x}}(n, \varphi) \right) + \\
&+ \kappa_x \left(\frac{3}{2} \bar{n}_{\bar{x}\bar{x}} - \frac{1}{2} n_{\bar{x}\bar{x}} - \frac{9}{4} Z_{\bar{x}\bar{x}}(\bar{n}, \bar{\varphi}) + \frac{5}{4} Z_{\bar{x}\bar{x}}(n, \varphi) \right) + \\
&+ \kappa_x \left(\frac{3}{2} \bar{n}_{\bar{x}\bar{x}} - \frac{1}{2} n_{\bar{x}\bar{x}} - \frac{9}{4} Z_{\bar{x}\bar{x}}(\bar{n}, \bar{\varphi}) + \frac{5}{4} Z_{\bar{x}\bar{x}}(n, \varphi) \right) \\
&+ \kappa_y \left(n_{\bar{y}\bar{y}} - Z_{\bar{y}\bar{y}}(n, \varphi) \right) + \kappa_y \left(\frac{3}{2} \bar{n}_{\bar{y}\bar{y}} - \frac{1}{2} n_{\bar{y}\bar{y}} - \frac{9}{8} Z_{\bar{y}\bar{y}}(\bar{n}, \bar{\varphi}) + \frac{1}{8} Z_{\bar{y}\bar{y}}(n, \varphi) \right) + \\
&+ \kappa_y \left(\frac{3}{4} \bar{n}_{\bar{y}\bar{y}} + \frac{1}{4} n_{\bar{y}\bar{y}} - \frac{9}{8} Z_{\bar{y}\bar{y}}(\bar{n}, \bar{\varphi}) - \frac{9}{8} Z_{\bar{y}\bar{y}}(\bar{n}, \bar{\varphi}) + \frac{5}{4} Z_{\bar{y}\bar{y}}(n, \varphi) \right) + \\
&+ \kappa_z \left(n_{\bar{z}\bar{z}} - Z_{\bar{z}\bar{z}}(n, \varphi) \right) + \kappa_z \left(n_{\bar{z}\bar{z}} - \frac{9}{8} Z_{\bar{z}\bar{z}}(\bar{n}, \bar{\varphi}) + \frac{1}{8} Z_{\bar{z}\bar{z}}(n, \varphi) \right) + \\
&+ \kappa_z \left(\frac{3}{2} \hat{n}_{\bar{z}\bar{z}} - \frac{1}{2} n_{\bar{z}\bar{z}} - \frac{9}{8} Z_{\bar{z}\bar{z}}(\bar{n}, \bar{\varphi}) - \frac{9}{8} Z_{\bar{z}\bar{z}}(\bar{n}, \bar{\varphi}) + \frac{5}{4} Z_{\bar{z}\bar{z}}(n, \varphi) \right)
\end{aligned} \tag{2.6.52}$$

Путем математических преобразований выражение (2.6.52) записывается в следующем виде:

$$\begin{aligned}
\frac{\hat{n} - n}{\tau} - \frac{\hat{N} - N}{\tau} &= \kappa_x \left(\frac{3}{2} (\bar{n}_{\bar{x}\bar{x}} - Z_{\bar{x}\bar{x}}(\bar{n}, \bar{\varphi})) - \frac{1}{2} (n_{\bar{x}\bar{x}} - Z_{\bar{x}\bar{x}}(n, \varphi)) \right) + \\
&+ \kappa_y \left(\frac{3}{4} (\bar{n}_{\bar{y}\bar{y}} - Z_{\bar{y}\bar{y}}(\bar{n}, \bar{\varphi})) + \frac{1}{4} (n_{\bar{y}\bar{y}} - Z_{\bar{y}\bar{y}}(n, \varphi)) - \frac{3}{8} (Z_{\bar{y}\bar{y}}(\bar{n}, \bar{\varphi}) - Z_{\bar{y}\bar{y}}(n, \varphi)) \right) + \\
&+ \kappa_z \left(\frac{1}{2} (\hat{n}_{\bar{z}\bar{z}} - Z_{\bar{z}\bar{z}}(\bar{n}, \bar{\varphi})) + \frac{1}{2} (n_{\bar{z}\bar{z}} - Z_{\bar{z}\bar{z}}(n, \varphi)) - \frac{1}{8} (Z_{\bar{z}\bar{z}}(\bar{n}, \bar{\varphi}) - 6Z_{\bar{z}\bar{z}}(\bar{n}, \bar{\varphi}) + 5Z_{\bar{z}\bar{z}}(n, \varphi)) \right)
\end{aligned} \tag{2.6.53}$$

По аналогии с (2.6.18) просуммируем (2.6.53) по всей области и применим к полученному результату формулы (2.1.30) и граничные условия (2.6.47), (2.6.49), (2.6.51):

$$\begin{aligned}
\frac{\hat{Q} - Q}{\tau} &= \frac{3}{2} h_y h_z \kappa_x \sum_{j=1}^{P_y-1} \sum_{k=1}^{P_z-1} \left((\bar{n}_{\bar{x}, P_x j k} + \mu_x \bar{n}_{P_x - 0.5 j k} E_x) - (\bar{n}_{x, 0 j k} + \mu_x \bar{n}_{0.5 j k} E_x) \right) + \\
&+ \frac{3}{8} h_x h_z \kappa_y \sum_{l=1}^{P_x-1} \sum_{k=1}^{P_z-1} \left((\mu_y (\bar{n}_{l P_y - 0.5 k} - \bar{n}_{l P_y - 0.5 k}) E_y) - (\mu_y (\bar{n}_{l 0.5 k} - \bar{n}_{l 0.5 k}) E_y) \right) + \\
&+ \frac{1}{2} h_x h_y \kappa_z \sum_{l=1}^{P_x-1} \sum_{j=1}^{P_z-1} \left((n_{\bar{z}, l j P_z} + \mu_z n_{l j P_z - 0.5} E_z) + \frac{1}{4} \mu_z (\bar{n}_{l j P_z - 0.5} - 6\bar{n}_{l j P_z - 0.5} + 5n_{l j P_z - 0.5}) E_z - \right. \\
&\left. - (n_{z, l j 0} + \mu_z n_{l j 0.5} E_z) - \frac{1}{4} \mu_z (\bar{n}_{l j 0.5} - 6\bar{n}_{l j 0.5} + 5n_{l j 0.5}) E_z \right)
\end{aligned} \tag{2.6.54}$$

Не трудно заметить, что правая часть (2.6.54) обращается в нуль если $E_x = E_y = E_z = 0$, следовательно схема (2.6.46) – (2.6.51) удовлетворяет закону сохранения заряда в случае использования однородных граничных условий. *Конец доказательства.*

§2.7. Разностные схемы для задачи нахождения начальных распределений характеристик полупроводника

Для решения эволюционной задачи распространения оптического импульса в полупроводнике необходимо задать начальные распределения характеристик полупроводника, согласованные с поставленными граничными условиями. В главе 1 были сформулированы дифференциальные постановки задачи нахождения начальных распределений функций. В данном параграфе рассматриваются разностные постановки и обсуждаются методы их решения.

При работе над параграфом использовались материалы из публикаций автора [A10, A13].

2.7.1. Разностные схемы для задачи нахождения начального распределения характеристик полупроводника в 2D случае при воздействии внешнего электрического поля

Для нахождения начального распределения характеристик 2D полупроводника в случае его нахождения во внешнем электрическом поле (при постановке неоднородных граничных условий для потенциала электрического поля (1.1.5)), рассмотрим систему уравнений (1.3.8), полученную из стационарной системы дифференциальных уравнений (1.1.16) с помощью метода установления.

Для численного решения системы (1.3.8) с граничными условиями (1.1.5) – (1.1.6) в работе использовался метод расщепления (метод переменных направлений). Согласно данному методу, сначала необходимо найти распределения функций на промежуточном временном слое:

$$\begin{aligned} \frac{\bar{N} - N}{0.5\tau_0} &= -\frac{n\bar{N} - n_0^2}{\tau_N}, \quad l = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{0, P_y}, \\ \frac{\bar{n} - n}{0.5\tau_0} &= \kappa_x (\bar{n}_{\bar{x}\bar{x}} - Z_{\bar{x}\bar{x}}(n, \varphi)) + \kappa_y (n_{\bar{y}\bar{y}} - Z_{\bar{y}\bar{y}}(n, \varphi)) - \frac{n\bar{N} - n_0^2}{\tau_N}, \quad l = \overline{1, P_x - 1}, \quad j = \overline{1, P_y - 1}, \\ \frac{\bar{\varphi} - \varphi}{0.5\tau_0} &= \bar{\varphi}_{\bar{x}\bar{x}} + \varphi_{\bar{y}\bar{y}} - \gamma(\bar{n} - \bar{N}), \quad l = \overline{1, P_x - 1}, \quad j = \overline{1, P_y - 1}, \end{aligned} \quad (2.7.1)$$

с граничными условиями:

$$\begin{aligned} \bar{\varphi}_{x,0j} = \bar{\varphi}_{\bar{x},P_xj} &= -E_x, \quad \bar{n}_{x,0j} + \mu_x n_{0.5j} E_x = \bar{n}_{\bar{x},P_xj} + \mu_x n_{P_x-0.5j} E_x = 0, \quad j = \overline{0, P_y}, \\ \bar{\varphi}_{y,l0} = \bar{\varphi}_{\bar{y},lP_y} &= -E_y, \quad \bar{n}_{y,l0} + \mu_y \bar{n}_{l0.5} E_y = \bar{n}_{\bar{y},lP_y} + \mu_y \bar{n}_{lP_y-0.5} E_y = 0, \quad l = \overline{0, P_x}, \end{aligned} \quad (2.7.2)$$

где τ_0 – шаг по искусственному времени.

После этого находятся распределения функций на верхнем временном слое:

$$\begin{aligned} \frac{\hat{N} - \bar{N}}{0.5\tau_0} &= -\frac{\bar{n}\hat{N} - n_0^2}{\tau_N}, \quad l = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{0, P_y}, \\ \frac{\hat{n} - \bar{n}}{0.5\tau_0} &= \kappa_x (\hat{n}_{\bar{x}\bar{x}} - Z_{\bar{x}\bar{x}}(\bar{n}, \bar{\varphi})) + \kappa_y (\hat{n}_{\bar{y}\bar{y}} - Z_{\bar{y}\bar{y}}(\bar{n}, \bar{\varphi})) - \frac{\bar{n}\hat{N} - n_0^2}{\tau_R}, \quad l = \overline{1, P_x - 1}, \quad j = \overline{1, P_y - 1}, \\ \frac{\hat{\varphi} - \bar{\varphi}}{0.5\tau_0} &= \bar{\varphi}_{\bar{x}\bar{x}} + \hat{\varphi}_{\bar{y}\bar{y}} - \gamma(\hat{n} - \hat{N}), \quad l = \overline{1, P_x - 1}, \quad j = \overline{1, P_y - 1}, \end{aligned} \quad (2.7.3)$$

с граничными условиями:

$$\begin{aligned} \hat{\varphi}_{x,0j} = \hat{\varphi}_{\bar{x},P_xj} &= -E_x, \quad \hat{n}_{x,0j} + \mu_x \hat{n}_{0.5j} E_x = \hat{n}_{\bar{x},P_xj} + \mu_x \hat{n}_{P_x-0.5j} E_x = 0, \quad j = \overline{0, P_y}, \\ \hat{\varphi}_{y,l0} = \hat{\varphi}_{\bar{y},lP_y} &= -E_y, \quad \hat{n}_{y,l0} + \mu_y \bar{n}_{l0.5} E_y = \hat{n}_{\bar{y},lP_y} + \mu_y \bar{n}_{lP_y-0.5} E_y = 0, \quad l = \overline{0, P_x}. \end{aligned} \quad (2.7.4)$$

Критерием остановки вычислений по искусственному времени служат значения невязок:

$$\begin{aligned} |\hat{n}\hat{N} - n_0^2| &< \varepsilon_1^0, \quad l = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{0, P_y}, \\ \left| (\hat{n}_{\bar{x}\bar{x}} - Z_{\bar{x}\bar{x}}(\hat{n}, \hat{\varphi})) + \frac{\kappa_y}{\kappa_x} (\hat{n}_{\bar{y}\bar{y}} - Z_{\bar{y}\bar{y}}(\hat{n}, \hat{\varphi})) \right| &< \varepsilon_2^0, \quad l = \overline{1, P_x - 1}, \quad j = \overline{1, P_y - 1}, \\ |\Lambda\hat{\varphi} - \gamma(\hat{n} - \hat{N})| &< \varepsilon_3^0, \quad l = \overline{1, P_x - 1}, \quad j = \overline{1, P_y - 1}, \quad \varepsilon_1^0, \varepsilon_2^0, \varepsilon_3^0 > 0. \end{aligned} \quad (2.7.5)$$

В качестве начального приближения используются значения, соответствующие случаю отсутствия внешнего электрического поля (однородных граничных условий для потенциала электрического поля):

$$\varphi_{ij}^0 = 0, \quad n_{ij}^0 = N_{ij}^0 = n_0, \quad l = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{0, P_y}. \quad (2.7.6)$$

Замечание. Отношение κ_y / κ_x в (2.7.5) используется для удобства использования критерия – значения коэффициентов диффузии могут представлять собой довольно малую величину. В этом случае при использовании критерия вида

$$\left| \kappa_x (\hat{n}_{\bar{x}x} - Z_{\bar{x}x}(\hat{n}, \hat{\phi})) + \kappa_y (\hat{n}_{\bar{y}y} - Z_{\bar{y}y}(\hat{n}, \hat{\phi})) \right| < \varepsilon_2^0 \quad (2.7.7)$$

необходимо уменьшать ε_2^0 на несколько порядков относительно ε_1^0 и ε_3^0 иначе критерий будет выполнен даже если выражения $(\hat{n}_{\bar{x}x} - Z_{\bar{x}x}(\hat{n}, \hat{\phi}))$ и $(\hat{n}_{\bar{y}y} - Z_{\bar{y}y}(\hat{n}, \hat{\phi}))$ принимают достаточно большие значения (к примеру, если $\kappa_x = \kappa_y = 10^{-5}$, а $\varepsilon_2^0 = 10^{-4}$).

2.7.2. Разностная схема для задачи нахождения начального распределения характеристик полупроводника в 3D случае при воздействии внешнего электрического поля по всем осям координат

Для нахождения начального распределения характеристик 3D полупроводника в случае его нахождения во внешнем электрическом поле (1.2.1) – (1.2.6) воспользуемся методом установления для системы (1.2.12) аналогичном (1.3.8):

$$\begin{aligned} \frac{\partial N}{\partial t_0} &= -\frac{nN - n_0^2}{\tau_N}, \quad 0 \leq x \leq L_x, \quad 0 \leq y \leq L_y, \quad 0 \leq z \leq L_z, \quad t_0 > 0, \\ \frac{\partial n}{\partial t_0} &= \kappa_x \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial n}{\partial x} - \mu_x n \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) + \kappa_y \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial n}{\partial y} - \mu_y n \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) + \kappa_z \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial n}{\partial z} - \mu_z n \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right) - \frac{nN - n_0^2}{\tau_N}, \\ \frac{\partial \varphi}{\partial t_0} &= \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} - \gamma(n - N), \quad 0 < x < L_x, \quad 0 < y < L_y, \quad 0 \leq z \leq L_z, \quad t_0 > 0, \end{aligned} \quad (2.7.8)$$

где t_0 – искусственно добавленное время, а τ_N – регуляризатор.

Задача (2.7.8) представляет собой систему нелинейных нестационарных дифференциальных уравнений. Воспользуемся обозначениями (2.3.1) – (2.3.3) и запишем для нее схему типа Кранка-Николсона:

$$\begin{aligned}
\frac{\hat{N} - N}{\tau_0} &= -R, \quad l = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{0, P_y}, \quad k = \overline{0, P_z}, \\
\frac{\hat{n} - n}{\tau_0} &= \kappa_x \left(n_{\bar{x}\bar{x}} - Z_{\bar{x}\bar{x}}(n, \varphi) \right) + \kappa_y \left(n_{\bar{y}\bar{y}} - Z_{\bar{y}\bar{y}}(n, \varphi) \right) + \kappa_z \left(n_{\bar{z}\bar{z}} - Z_{\bar{z}\bar{z}}(n, \varphi) \right) - R, \\
l &= \overline{1, P_x - 1}, \quad j = \overline{1, P_y - 1}, \quad k = \overline{1, P_z - 1}, \\
\frac{\hat{\varphi} - \varphi}{\tau_0} &= \Lambda \varphi - \gamma(n - N), \quad l = \overline{1, P_x - 1}, \quad j = \overline{1, P_y - 1}, \quad k = \overline{1, P_z - 1},
\end{aligned} \tag{2.7.9}$$

где τ_0 – шаг по искусственно добавленному времени. В качестве аппроксимации граничных условий здесь используются условия (2.3.8).

Вычисления продолжаются до тех пор, пока на верхнем слое не будет выполнено следующее условие:

$$\begin{aligned}
|\hat{n}\hat{N} - n_0^2| &< \varepsilon_1^0, \quad l = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{0, P_y}, \quad k = \overline{0, P_z}, \\
\left| \left(\hat{n}_{\bar{x}\bar{x}} - Z_{\bar{x}\bar{x}}(\hat{n}, \hat{\varphi}) \right) + \frac{\kappa_y}{\kappa_x} \left(\hat{n}_{\bar{y}\bar{y}} - Z_{\bar{y}\bar{y}}(\hat{n}, \hat{\varphi}) \right) + \frac{\kappa_z}{\kappa_x} \left(\hat{n}_{\bar{z}\bar{z}} - Z_{\bar{z}\bar{z}}(\hat{n}, \hat{\varphi}) \right) \right| &< \varepsilon_2^0, \\
l &= \overline{1, P_x - 1}, \quad j = \overline{1, P_y - 1}, \quad k = \overline{0, P_z}, \\
|\Lambda \hat{\varphi} - \gamma(\hat{n} - \hat{N})| &< \varepsilon_1^0, \quad l = \overline{1, P_x - 1}, \quad j = \overline{1, P_y - 1}, \quad k = \overline{0, P_z}, \quad \varepsilon_1^0, \varepsilon_2^0, \varepsilon_3^0 > 0.
\end{aligned} \tag{2.7.10}$$

В качестве начального приближения используются значения, соответствующие случаю отсутствия внешнего электрического поля:

$$\varphi_{ljk}^0 = 0, \quad n_{ljk}^0 = N_{ljk}^0 = n_0, \quad l = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{0, P_y}, \quad k = \overline{0, P_z}. \tag{2.7.11}$$

Т. к. система разностных уравнений (2.7.9) нелинейна, то для ее решения воспользуемся ТЭИП, рассмотренным в §2.6.

Для схемы (2.7.9) первый этап ТЭИП записывается в следующем виде:

$$\begin{aligned}
\frac{\hat{N} - N}{\tau_0} &= -R, \quad l = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{0, P_y}, \quad k = \overline{0, P_z}, \\
\frac{\hat{n} - n}{\tau_0} &= \kappa_x \left(n_{\bar{x}\bar{x}} - Z_{\bar{x}\bar{x}}(n, \varphi) \right) + \kappa_y \left(n_{\bar{y}\bar{y}} - Z_{\bar{y}\bar{y}}(n, \varphi) \right) + \kappa_z \left(n_{\bar{z}\bar{z}} - Z_{\bar{z}\bar{z}}(n, \varphi) \right) - R, \\
l &= \overline{1, P_x - 1}, \quad j = \overline{1, P_y - 1}, \quad k = \overline{1, P_z - 1}, \\
\frac{\hat{\varphi} - \varphi}{\tau_0} &= \hat{\varphi}_{\bar{x}\bar{x}} + \hat{\varphi}_{\bar{y}\bar{y}} + \hat{\varphi}_{\bar{z}\bar{z}} - \gamma(\hat{n} - \hat{N}), \quad l = \overline{1, P_x - 1}, \quad j = \overline{1, P_y - 1}, \quad k = \overline{1, P_z - 1},
\end{aligned} \tag{2.7.12}$$

с граничными условиями (2.6.6).

Второй этап записывается в виде:

$$\begin{aligned} \frac{\hat{N}^{s+2} - N}{\tau_0} &= -R, \quad l = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{0, P_y}, \quad k = \overline{0, P_z}, \\ \frac{\hat{n}^{s+2} - n}{\tau_0} &= \kappa_x \left(n_{\bar{x}\bar{x}}^{s+1} - Z_{\bar{x}\bar{x}}^{s+1}(n, \varphi) \right) + \kappa_y \left(n_{\bar{y}\bar{y}}^{s+1} - Z_{\bar{y}\bar{y}}^{s+1}(n, \varphi) \right) + \kappa_z \left(n_{\bar{z}\bar{z}}^{s+1} - Z_{\bar{z}\bar{z}}^{s+1}(n, \varphi) \right) - R, \\ l &= \overline{1, P_x - 1}, \quad j = \overline{1, P_y - 1}, \quad k = \overline{1, P_z - 1}, \\ \frac{\hat{\varphi}^{s+2} - \varphi}{\tau_0} &= \hat{\varphi}_{\bar{x}\bar{x}}^{s+1} + \hat{\varphi}_{\bar{y}\bar{y}}^{s+2} + \hat{\varphi}_{\bar{z}\bar{z}}^s - \gamma(\hat{n}^{s+2} - \hat{N}^{s+2}), \quad l = \overline{1, P_x - 1}, \quad j = \overline{1, P_y - 1}, \quad k = \overline{1, P_z - 1}, \end{aligned} \quad (2.7.13)$$

с граничными условиями (2.6.11).

Третий этап записывается в виде:

$$\begin{aligned} \frac{\hat{N}^{s+3} - N}{\tau_0} &= -R, \quad l = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{0, P_y}, \quad k = \overline{0, P_z}, \\ \frac{\hat{n}^{s+3} - n}{\tau_0} &= \kappa_x \left(n_{\bar{x}\bar{x}}^{s+2} - Z_{\bar{x}\bar{x}}^{s+2}(n, \varphi) \right) + \kappa_y \left(n_{\bar{y}\bar{y}}^{s+2} - Z_{\bar{y}\bar{y}}^{s+2}(n, \varphi) \right) + \kappa_z \left(n_{\bar{z}\bar{z}}^{s+2} - Z_{\bar{z}\bar{z}}^{s+2}(n, \varphi) \right) - R, \\ l &= \overline{1, P_x - 1}, \quad j = \overline{1, P_y - 1}, \quad k = \overline{1, P_z - 1}, \\ \frac{\hat{\varphi}^{s+3} - \varphi}{\tau_0} &= \hat{\varphi}_{\bar{x}\bar{x}}^{s+1} + \hat{\varphi}_{\bar{y}\bar{y}}^{s+2} + \hat{\varphi}_{\bar{z}\bar{z}}^{s+3} - \gamma(\hat{n}^{s+3} - \hat{N}^{s+3}), \quad l = \overline{1, P_x - 1}, \quad j = \overline{1, P_y - 1}, \quad k = \overline{1, P_z - 1}, \end{aligned} \quad (2.7.14)$$

с граничными условиями (2.6.15).

В качестве начального приближения используется значение с предыдущего слоя по искусственному времени:

$$\hat{n}^0 = n, \quad \hat{N}^0 = N, \quad \hat{\varphi}^0 = \varphi, \quad l = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{0, P_y}, \quad k = \overline{0, P_z}. \quad (2.7.15)$$

Итерационный процесс повторяется до тех пор, пока не будут выполнены следующие условия:

$$\begin{aligned} |\hat{n}^{s+3} - \hat{n}^s| < |\hat{n}^s| \varepsilon_4 + \varepsilon_5, \quad |\hat{N}^{s+3} - \hat{N}^s| < |\hat{N}^s| \varepsilon_4 + \varepsilon_5, \quad |\hat{\varphi}^{s+3} - \hat{\varphi}^s| < |\hat{\varphi}^s| \varepsilon_4 + \varepsilon_5, \\ l &= \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{0, P_y}, \quad k = \overline{0, P_z}. \end{aligned} \quad (2.7.16)$$

После выполнения условия (2.7.16) осуществляется проверка условия (2.7.10). Если оно не выполнено, то, согласно схеме (2.7.9), осуществляется переход на следующий слой

искусственного времени и итерационный процесс (2.7.12) – (2.7.14) повторяется, но уже для нового слоя. Если же условие (2.7.10) выполнено, то решение задачи (1.2.24) получено с заданной точностью.

2.7.3. Разностные схемы для задачи нахождения начального распределения характеристик полупроводника в 3D случае при воздействии электрического поля по одной или двум координатам

Как уже говорилось в §1.1.3 и §1.2.3, в случае отсутствия внешнего поля вдоль одной из координат для 3D случая достаточно решить соответствующую 2D задачу (1.1.16) с помощью разностной схемы (2.7.1) – (2.7.4) и обобщить ее решение на всю ось, вдоль которой внешнее поле равно нулю. Так же, в случае равенства коэффициентов подвижности, система (1.1.16) сводится к 1D (1.1.17). Аналогичное уравнение необходимо решить и для случая, когда внешнее поле присутствует только вдоль одной из осей координат.

Существует великое множество методов решения 1D нелинейных дифференциальных уравнений. В частности, автором была использована следующая разностная схема (запись метода приведена для случая $E_x \neq 0$):

$$\begin{aligned} \frac{\varphi^{s+1} - \varphi^s}{\tau_0} &= \frac{\varphi_{\bar{x}\bar{x}}^{s+1} + \varphi_{\bar{x}\bar{x}}^s}{2} - \gamma n_0 (e^{\mu_x \varphi^s} - e^{-\mu_x \varphi^s}), \quad l = \overline{1, P_x - 1}, \\ \frac{\varphi_1^{s+1} - \varphi_0^{s+1}}{h_x} &= \frac{\varphi_{P_x}^{s+1} - \varphi_{P_x - 1}^{s+1}}{h_x} = -E_x. \end{aligned} \quad (2.7.17)$$

где φ_l^s – распределение потенциала вдоль оси x на s -ой итерации, τ_0 – итерационный параметр.

Сходимость итераций определялась следующим критерием:

$$\left| \varphi_{\bar{x}\bar{x}}^{s+1} - \gamma n_0 (e^{\mu_x \varphi^{s+1}} - e^{-\mu_x \varphi^{s+1}}) \right| < \bar{\varepsilon}_1, \quad \bar{\varepsilon}_1 > 0, \quad l = \overline{0, P_x}. \quad (2.7.18)$$

Начальные распределения концентраций вдоль оси x вычисляются через найденное значение потенциала:

$$n_l^0 = n_0 e^{\mu_x \varphi_l^0}, \quad N_{ij}^0 = n_0 e^{-\mu_x \varphi_l^0}, \quad l = \overline{0, P_x}. \quad (2.7.19)$$

После чего найденное решение обобщается на все оставшиеся оси координат.

Замечание. Для решения задачи нахождения начальных распределений характеристик 3D полупроводника в 1D внешнем поле вполне можно использовать 3D метод (2.7.12) – (2.7.14) с соответствующими граничными условиями, однако использование разных численных методов в зависимости от направления внешнего поля позволяет значительно уменьшить машинное время, необходимое для нахождения начального распределения характеристик полупроводника.

§2.8. Численные методы решения задачи Неймана для уравнения Пуассона

В системы дифференциальных уравнений (1.1.1) – (1.1.6) и (1.2.1) – (1.2.6) входит уравнение Пуассона (1.1.3), (1.2.3), записанное относительно потенциала лазеро-индуцированного электрического поля, с граничными условиями Неймана. Поскольку рассматриваемый процесс взаимодействия оптического импульса с полупроводником является нестационарным, то требуется решать разностную задачу Неймана на каждом временном слое неоднократно (на каждом этапе итерационного процесса или на промежуточных временных слоях, в зависимости от выбранного метода решения эволюционной задачи). Так как в уравнения (1.1.2) и (1.2.2) входит слагаемое, описывающее конвективный перенос в уравнении относительно концентрации свободных электронов (слагаемое с подвижностью электронов), то между концентрацией свободных электронов и лазеро-индуцированным электрическим полем полупроводника осуществляется нелинейная обратная связь. В данном параграфе обсуждаются численные подходы к решению уравнения Пуассона – прямые и итерационные методы.

Рассмотрим 2D разностную задачу Неймана для уравнения Пуассона:

$$\begin{aligned} \Delta \hat{\phi} &= \gamma(\hat{n} - \hat{N}), \quad l = \overline{1, P_x - 1}, \quad j = \overline{1, P_y - 1}, \\ \hat{\phi}_{x,0j} &= \hat{\phi}_{\bar{x}, P_x j} = -E_x, \quad j = \overline{0, P_y}, \\ \hat{\phi}_{y,l0} &= \hat{\phi}_{\bar{y}, l P_y} = -E_y, \quad l = \overline{0, P_x}. \end{aligned} \quad (2.8.1)$$

Как было показано в п. 1.1.4 для дифференциальной постановки рассматриваемой задачи условие разрешимости для задачи Неймана совпадает с законом сохранения заряда. Такая же связь имеет место и для разностной задачи, закон сохранения заряда имеет вид:

$$\sum_{l=1}^{P_x-1} \sum_{j=1}^{P_y-1} h_x h_y (n_{lj} - N_{lj}) = 0. \quad (2.8.2)$$

Таким образом, прямой метод может быть применим для решения уравнения Пуассона только в случае, когда разностная схема консервативна. Кроме того, концентрации заряженных частиц, входящие в (2.8.2), вычисляются с ограниченной точностью.

Ошибки при вычислении правой части уравнения Пуассона вносят отклонения в решение уравнения (2.8.1), что, в свою очередь, из-за присутствия подвижности электронов в уравнении относительно концентрации свободных электронов (1.1.2) и, обусловленной этим, нелинейной обратной связи между уравнениями системы, приводит к нарастанию погрешности при вычислении концентраций и еще большему искажению правой части уравнения Пуассона. Так как данные вычисления происходят неоднократно на каждом временном слое, то в результате это приводит к лавинообразному росту вычислительной погрешности и существенному искажению решения эволюционной системы уравнений (рис. 2.8.1). Как следствие, происходит рост инварианта и нарушение условий разрешимости задачи Неймана.

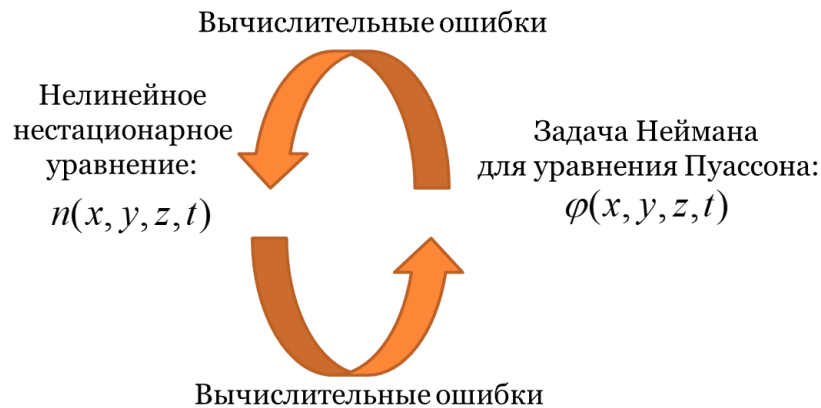


Рисунок 2.8.1. Влияние нелинейной обратной связи на точность решения.

При работе над параграфом использовались материалы из публикаций автора [A10, A13].

2.8.1. Прямой метод решения 2D и 3D задачи Неймана для уравнения Пуассона

Одним из наиболее распространенных прямых методов для решения эллиптических задач в простой области является быстрое дискретное преобразование Фурье (БДПФ). Этот метод давно доказал свою эффективность [184-198] (высокую точность вычислений и быстроедействие) и широко применяется в исследованиях. Однако, как показали вычислительные эксперименты, при его использовании для решения системы уравнений с нелинейной обратной связью следует

учитывать некоторые особенности задачи. Более подробно данный вопрос будет рассмотрен в §3.3.

2.8.2. Итерационные методы решения 2D и 3D задачи Неймана для уравнения Пуассона (метод переменных направлений и метод стабилизирующей поправки)

Итерационные методы широко применяются при решении стационарных задач математической физики. В этом случае они могут интерпретироваться как методы установления: решение стационарного уравнения рассматривается как предельный случай при $t \rightarrow \infty$ решения нестационарного уравнения. Тогда уравнение (2.1.11) преобразуется к виду:

$$\frac{\hat{\varphi} - \varphi}{\tau_p} = \Lambda \hat{\varphi} - \gamma(\hat{N} - \hat{n}), \quad (2.8.3)$$

где итерационный параметр τ_p представляет собой аналог искусственно введенного времени. Основное отличие в выборе значения параметра τ_p от задания разностного шага по времени τ заключается в том, что τ выбирается из соображений точности аппроксимации, а τ_p – из условия минимальности числа итераций.

Заметим, что (2.8.3) является разностной аппроксимацией дифференциального уравнения Гельмгольца:

$$-\Delta \varphi + \eta \varphi = f, \quad \eta = \frac{1}{\tau_p}. \quad (2.8.4)$$

Как известно, решение задачи Неймана для уравнения вида (2.8.4) существует и единственно если $\eta > 0$ [106, 204]. Следовательно, и уравнение (2.8.3) имеет единственное решение, если константа τ_p положительна, что очевидно выполняется.

Для решения 2D уравнений (2.4.4) и (2.4.9) в работе используется метод переменных направлений. В этом случае решение двумерной задачи проводится в два шага, на каждом из которых для решения уравнения используется метод прогонки. Применяя метод переменных направлений (МПН) как итерационный метод к стационарному эллиптическому уравнению (2.8.3) на каждом временном слое и каждом этапе ДЭИП (2.4.2) – (2.4.11) получим:

$$f^0 = \hat{\phi}^s,$$

$$\frac{f^{p+0.5} - f^p}{\tau_p/2} = f_{\bar{x}\bar{x}}^{p+0.5} + f_{\bar{y}\bar{y}}^p - \gamma \left(\hat{n}^{s+1} - \hat{N}^{s+1} \right), \quad (2.8.5)$$

$$\frac{f^{p+1} - f^{p+0.5}}{\tau_p/2} = f_{\bar{x}\bar{x}}^{p+0.5} + f_{\bar{y}\bar{y}}^{p+1} - \gamma \left(\hat{n}^{s+1} - \hat{N}^{s+1} \right),$$

$$f_{x,0j}^{p+0.5} = f_{\bar{x},P_xj}^{p+0.5} = -E_x, \quad j = \overline{0, P_y}, \quad f_{y,l0}^{p+1} = f_{\bar{y},lP_y}^{p+1} = -E_y, \quad l = \overline{0, P_x}, \quad (2.8.6)$$

где τ_p – итерационный параметр, p – номер итерации дополнительного итерационного процесса, s – номер итерации в (2.4.2) – (2.4.11). Схема абсолютно устойчива и обладает вторым порядком аппроксимации по пространственным координатам и по времени [219].

В качестве критерия сходимости итерационного процесса (2.8.5) – (2.8.6) было рассмотрено два варианта:

$$|f^{p+1} - f^p| < |f^p| \varepsilon_3 + \varepsilon_4, \quad l = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{0, P_y}, \quad (2.8.7)$$

$$|\Psi(f^{p+1})| = \Lambda |f^{p+1} - \gamma(\hat{n}^{s+1} - \hat{N}^{s+1})| < \varepsilon_5, \quad l = \overline{1, P_x - 1}, \quad j = \overline{1, P_y - 1}. \quad (2.8.8)$$

Сравнение данных критериев будет проведено в п.3.1.3.

В случае удовлетворения выбранному критерию полагается, что решение найдено ($\hat{\phi}^{s+1} = f^{p+1}$) и осуществляется переход к следующему этапу двухэтапного итерационного процесса (2.4.2) – (2.4.11) или следующему временному слою.

Как обсуждалось выше, при решении 3D задач необходимо использовать метод стабилизирующей поправки (метод Дугласа) [121], который является устойчивым и обладает вторым порядком аппроксимации. Для его практической реализации использовался следующий алгоритм:

$$\begin{aligned}
f^0 &= \hat{\phi}^s, \\
\frac{f^{p+1/3} - f^p}{\tau_p/3} &= \frac{3}{2} f^{p+1/3}{}_{\bar{x}\bar{x}} - \frac{1}{2} f^p{}_{\bar{x}\bar{x}} + f^p{}_{\bar{y}\bar{y}} + f^p{}_{\bar{z}\bar{z}} - \gamma \left(\hat{n}^{s+1} - \hat{N}^{s+1} \right), \\
\frac{f^{p+2/3} - 2f^{p+1/3} + f^p}{\tau_p/3} &= \frac{3}{2} \left(f^{p+2/3}{}_{\bar{y}\bar{y}} - f^p{}_{\bar{y}\bar{y}} \right), \\
\frac{f^{p+1} - 3/2 f^{p+2/3} + 1/2 f^p}{\tau_p/3} &= \frac{3}{2} \left(f^{p+1}{}_{\bar{z}\bar{z}} - f^p{}_{\bar{z}\bar{z}} \right),
\end{aligned} \tag{2.8.9}$$

с граничными условиями:

$$\begin{aligned}
f_{x,0jk}^{p+1/3} &= f_{\bar{x},P_xjk}^{p+1/3} = -E_x, \quad j = \overline{1, P_y - 1}, \quad k = \overline{1, P_z - 1}, \\
f_{y,l0k}^{p+2/3} &= f_{\bar{y},lP_yk}^{p+2/3} = -E_y, \quad l = \overline{1, P_x - 1}, \quad k = \overline{1, P_z - 1}, \\
f_{z,lj0}^{p+1} &= f_{\bar{z},ljP_z}^{p+1} = -E_z, \quad l = \overline{1, P_x - 1}, \quad j = \overline{1, P_y - 1},
\end{aligned} \tag{2.8.10}$$

где p и s определяются выше. Критерии сходимости задаются формулами (2.5.7), (2.5.8).

Используя простые математические преобразования, схему (2.8.9) можно записать как:

$$\begin{aligned}
\frac{f^{p+1/3} - f^p}{\tau_p/3} &= \frac{3}{2} \left(f^{p+1/3}{}_{\bar{x}\bar{x}} - f^p{}_{\bar{x}\bar{x}} \right) + f^p{}_{\bar{x}\bar{x}} + f^p{}_{\bar{y}\bar{y}} + f^p{}_{\bar{z}\bar{z}} - \gamma \left(\hat{n}^{s+1} - \hat{N}^{s+1} \right), \\
\frac{f^{p+2/3} - f^p}{2\tau_p/3} &= \frac{f^{p+1/3} - f^p}{\tau_p/3} + \frac{3}{4} \left(f^{p+2/3}{}_{\bar{y}\bar{y}} - f^p{}_{\bar{y}\bar{y}} \right), \\
\frac{f^{p+1} - f^p}{\tau_p} &= \frac{f^{p+2/3} - f^p}{2\tau_p/3} + \frac{1}{2} \left(f^{p+1}{}_{\bar{z}\bar{z}} - f^p{}_{\bar{z}\bar{z}} \right).
\end{aligned} \tag{2.8.11}$$

Не трудно заметить, что система (2.8.11) эквивалента системе (2.6.38), используемой для построения метода расщепления для 3D задачи (1.2.1) – (1.2.6). Таким образом, проведя замену:

$$\xi^{p+1} = \frac{f^{p+1} - f^p}{\tau_p}, \quad \xi^{p+1/3} = \frac{f^{p+1/3} - f^p}{\tau_p/3}, \quad \xi^{p+2/3} = \frac{f^{p+2/3} - f^p}{2\tau_p/3} \tag{2.8.12}$$

получим схему (2.6.32) для уравнения (2.3.6).

Критерий сходимости итерационного процесса (2.8.9) – (2.8.10) основывался на оценке невязки:

$$|\Psi(f)| = |\Lambda f - \gamma(\hat{n}^{s+1} - \hat{N}^{s+1})| < \varepsilon_5, \quad l = \overline{1, P_x - 1}, \quad j = \overline{1, P_y - 1}, \quad k = \overline{1, P_z - 1}. \tag{2.8.13}$$

2.8.3. Алгоритмы выделения единственного решения при численном решении задачи Неймана

В §1.3. рассмотрена проблема выбора единственного решения задачи Неймана в зависимости от вида коэффициента поглощения. Для выделения единственного решения уравнения Пуассона необходимо провести дополнительную перенормировку в соответствии с выбранным критерием. Ниже рассмотрены численные варианты нормировок (1.3.1) и (1.3.2).

Для (1.3.1) нормировка проводится с фиксацией значения потенциала в угловой точке ($l=0, j=0$) для 2D случая:

$$\hat{\varphi}_{lj}^{s+1} = \varphi_{00} + f_{lj}^{p+1} - f_{00}^{p+1}, \quad l = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{0, P_y}, \quad (2.8.14)$$

или в точке ($l=0, j=0, k=0$) для 3D случая:

$$\hat{\varphi}_{ljk}^{s+1} = \varphi_{000} + f_{ljk}^{p+1} - f_{000}^{p+1}, \quad l = \overline{0, P_x}, \quad j = \overline{0, P_y}, \quad k = \overline{0, P_z}, \quad (2.8.15)$$

где $\hat{\varphi}^{s+1}$ – значение потенциала на верхнем временном слое, φ – значение потенциала на нижнем временном слое, f^{p+1} – численное решение, полученное при использовании метода (2.8.5) и (2.8.9) для 2D и 3D задач соответственно.

Нормировка на значение интеграла (1.3.2) для метода (2.8.5):

$$\hat{\varphi}^{s+1} = f^{p+1} + h_x h_y \sum_{l=1}^{P_x-1} \sum_{j=1}^{P_y-1} \left(\varphi_{lj} - f_{lj}^{p+1} \right). \quad (2.8.16)$$

Нормировка на значение интеграла (1.3.2) для метода (2.8.9):

$$\hat{\varphi}^{s+1} = f^{p+1} + h_x h_y h_z \sum_{l=1}^{P_x-1} \sum_{j=1}^{P_y-1} \sum_{k=1}^{P_z-1} \left(\varphi_{ljk} - f_{ljk}^{p+1} \right). \quad (2.8.17)$$

Замечание. Нормировки (2.8.14) – (2.8.17) предполагают, что они применяются после того, как было найдено численное решение, одно в случае использования критерия (2.8.7) для остановки итерационного процесса может быть целесообразно их применение после каждой итерации.

§2.9. Программный комплекс для компьютерного моделирования задачи распространения оптического импульса в полупроводнике

2.9.1. Вычислительный комплекс

Для численного решения задач (1.1.1) – (1.1.6), (1.1.12), (1.1.16), (1.2.1) – (1.2.6) и (1.2.12) был создан программный комплекс на языке C++, реализующий численные методы описанные в главе 2. Программы написаны на основе объектно-ориентированного подхода: полупроводник описан в виде класса, в переменных которого хранится его текущее состояние, а эволюционные процессы реализованы в методах данного класса. Всего было разработано 4 комплекса программ:

- 1) Численное решение 2D задачи распространения оптического импульса в полупроводнике без учета дифракционных эффектов (1.1.1) – (1.1.6). В рамках данного класса реализован двухэтапный итерационный процесс (2.4.2) – (2.4.13), метод расщепления (2.4.30) – (2.4.33) и модифицированный метод расщепления (2.4.36) – (2.4.38). Для решения уравнения Пуассона (1.1.3) используются метод переменных направлений (2.8.5). Для нахождения начальных распределений характеристик полупроводника в случае его нахождения во внешнем электрическом поле реализованы схемы (2.7.1) – (2.7.6) для 2D поля и (2.7.17) для 1D.
- 2) Численное решение 2D задачи распространения оптического импульса в полупроводнике с учетом дифракционных эффектов (1.1.1) – (1.1.3), (1.1.5) – (1.1.6), (1.1.12). Данный класс отличается от предыдущего расширенной пространственной областью вычислений, не совпадающей с областью полупроводника. Реализована возможность решения уравнения относительно комплексной амплитуды вне области, занятой полупроводником. Для работы с комплексными числами использовалась стандартная библиотека C++ `<complex>`. Для решения эволюционной задачи генерации полупроводниковой плазмы использовался двухэтапный итерационный процесс (2.4.2) – (2.4.13) с уравнением (2.4.14) вместо (2.4.5), и (2.4.15) вместо (2.4.10). Для решения уравнения Пуассона (1.1.3) использовался метод переменных направлений (2.8.5).
- 3) Численное решение 3D эволюционной задачи генерации полупроводниковой плазмы (1.2.1) – (1.2.6). В рамках данного класса был реализован трехэтапный итерационный процесс (2.6.2) – (2.6.15) и метод расщепления (2.6.46) – (2.6.51). Для решения уравнения Пуассона (1.2.3) использовался метод стабилизирующей поправки (2.8.9). Для реализации БДПФ использовался пакет Intel MKL. Для нахождения начального распределения характеристик полупроводника в

случае его нахождения во внешнем электрическом поле реализованы схемы (2.7.12) – (2.7.14) для 3D поля, (2.7.1) – (2.7.4) для 2D поля и (2.7.17) для 1D.

4) Моделирование ОБ для 2D случая: построение гистерезисных зависимостей концентрации свободных электронов от значения максимальной входной интенсивности падающего импульса (алгоритм подробно описан в §4.1). В данном программном комплексе реализована возможность пользовательского ввода значения входной интенсивности, отслеживание достижения системой стационарного состояния, установки в качестве начальных распределений функций значения этих функций, полученные при расчете с другим значением входной интенсивности.

В дополнение к этому, был создан отдельный комплекс программ для сравнения результатов, полученных как при использовании разных численных методов, так и при расчетах одним методом, но с разными шагами по времени или пространству. Например, программа, позволяющая находить разность между двумя уже найденными решениями в нормах C и L_2 .

При создании объекта в класс передаются свойства полупроводника (значения коэффициентов диффузии, подвижности и т. д.), параметры сетки, критерии останковки итерационных процессов, вид коэффициента подвижности (полевая или концентрационная модель) и параметры выходных данных. После этого выбирается необходимый численный метод и производится расчет.

Основные вычисления производились на серверах на базе Intel(R) Xeon(R) CPU E5-2690 v3 @ 2.60GHz (2 процессора с 12 ядрами и 24 потоками каждый). Для увеличения скорости расчетов программы были распараллелены средствами OpenMP. Например, для ДЭИП на каждой итерации все уравнения решаются строго в порядке, указанном в формулах (2.4.2) – (2.4.13), при этом каждое из уравнений распараллеливается отдельно. В частности, для уравнения (2.4.3) все одномерные прогонки, вычисляемые на данной итерации (вдоль оси x для первого этапа и вдоль оси y для второго этапа), распределялись по группам между разными потоками (рис. 2.9.1). Так как значения функций, которые используются при вычислении прогоночных коэффициентов, берутся либо с предыдущего слоя, либо с предыдущей итерации, то все потоки могут проводить расчеты для текущей итерации независимо друг от друга. После того, как все потоки закончат решать текущее уравнение, результаты собираются вместе и происходит переход к следующему уравнению системы (или итерации, если все уравнения на текущей уже решены).

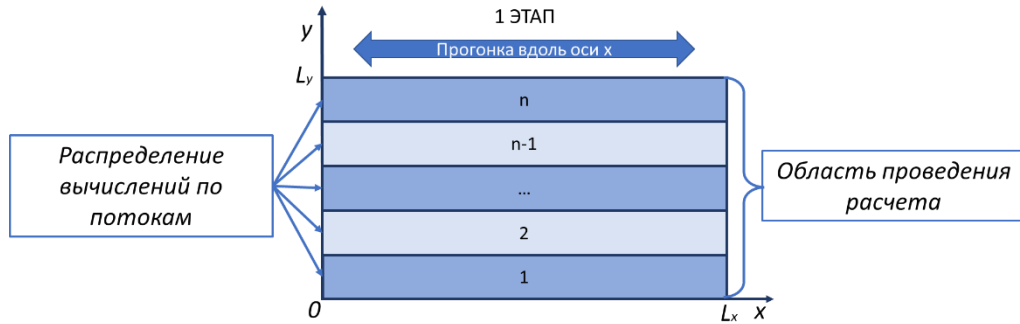


Рис. 2.9.1. Схема распараллеливания на примере первого этапа двухэтапного итерационного процесса (2.4.2) – (2.4.6), n – число потоков.

Так как какой-либо дополнительной оптимизации при распараллеливании не проводилось (к примеру, оптимизация чтения массивов с данными), то эффективность на большом числе процессоров оказалась низкой, однако даже при такой простой реализации можно наблюдать значительный прирост производительности при использовании от 2 до 10 потоков. В таблице 2.9.1 представлены результаты компьютерного моделирования с использованием ДЭИП (2.4.2) – (2.4.11) для значения параметров

$$\gamma = 10^3, D_x = D_y = 10^5, \delta_0 = 2, q_0 = 1.5, n_0 = 0.01, \mu_x = \mu_y = 1, \psi = 2.553, \\ \xi = 3, \tau_R = 1, \gamma = 10^3, a_x = 0.1, E_x = E_y = 0$$

на сетке $L_x = L_y = 1, h_x = h_y = 0.01, L_t = 10, \tau = 10^{-3}, \varepsilon_1 = 10^{-6}, \varepsilon_1 = 10^{-8}$ (10^4 узлов пространственной сетки на 10^4 слоев по времени). Для решения уравнения Пуассона использовался метод переменных направлений (2.8.5): $\tau_p = 10^{-3}, \varepsilon_s = 10^{-3}$. Как видно из таблицы, решение 2D в целом не занимает много времени и алгоритм позволяет проводить расчеты до 1000 единиц по времени без необходимости распараллеливания.

В 3D случае (2.6.2) – (2.6.15), помимо увеличения числа узлов разностной сетки, растет и количество операций, выполняемых на каждом слое. Таким образом, если 3D сетка $L_x = L_y = L_z = 1, h_x = h_y = h_z = 0.01$ (10^6 узлов пространственной сетки на 10^4 слоев по времени) имеет в 100 раз больше узлов по сравнению с 2D аналогом, то время расчета вырастает почти в 200 раз и даже расчет до 10 единиц на 1 ядре может занимать 16ч (таблица 2.9.2). Кроме того, в связи с увеличением количества операций, выполняемых на каждом слое, выросла и эффективность распараллеливания. Таким образом, как показали компьютерные эксперименты, при решении 3D задачи крайне рекомендуется использовать параллельные вычисления.

При решении 2D задачи распространения оптического импульса в полупроводнике с учетом дифракционных эффектов (1.1.1) – (1.1.3), (1.1.5) – (1.1.6) необходимо учитывать два момента. Во-первых, длина импульсов, отраженных от границы полупроводника, могут быть сопоставимы или меньше шага сетки. Таким образом для правильного расчета данных субимпульсов необходимо проводить расчеты на более мелких сетках. Во-вторых, импульс, отраженный от границы полупроводника, распространяется в направлении границы расчетной области, в то время как при постановке задачи (1.1.12) граничные условия для уравнения Шредингера ставятся из предположения что функция A и ее n -ая производные убывают, если соответствующая координата стремиться к бесконечности (1.1.15). Таким образом, на искусственно введенной границе расчетной области может произойти отражение и появление «ложной» волны, которая в свою очередь может повлиять на падающий импульс и исказить решение уравнения Шредингера. Чтобы избежать этого, необходимо расширять границы расчетной области по координате распространения оптического импульса, что существенно увеличивает время расчетов. В таблице 2.9.3 показано время расчетов на сетке $0 \leq x \leq 1$, $-50 \leq y \leq 50$, $h_x = 0.01$, $h_y = 0.001$ (10^7 узлов пространственной сетки на 10^4 слоев по времени). Как видно, время расчетов сопоставимо с решением 3D задачи без учета дифракционных эффектов, однако, в отличии от ранее рассмотренных случаев, увеличение времени численного эксперимента влечет за собой необходимость дальнейшего расширения области, что делает данный подход неэффективным с точки зрения машинного времени.

Таблица 2.9.1. Время расчета (в секундах) при распараллеливании на разное число потоков при использовании ДЭИП.

Число потоков	1	2	4	10	24	48
Время (сек)	346	211	131	104	93	103
Коэффициент ускорения	1	1.63	2.63	3.31	3.71	3.34

Таблица 2.9.2. Время расчета (в часах) при распараллеливании на разное число потоков при использовании ТЭИП.

Число потоков	1	2	4	10	24	48
Время (ч)	16.7	12.3	7.2	4.7	2.8	3

Коэффициент ускорения	1	1.36	2.3	3.56	5.96	5.56
-----------------------	---	------	-----	------	------	------

Таблица 2.9.3. Время расчета (в часах) при распараллеливании на разное число потоков при использовании ДЭИП для задачи диафрагмирующего оптического импульса.

Число потоков	1	2	4	10	24	48
Время (ч)	19.44242	15.49181	10.23944	7.023861	5.209778	5.295083
Коэффициент ускорения	1	1.255013	1.898777	2.768053	3.731909	3.671787

2.9.2. Средства визуализации и обработки информации

При проведении расчетов в программных пакетах реализован вывод полученных результатов в текстовые файлы. Так же сохраняется дополнительная информация, такая как значения инварианта и количество итераций на каждом временном слое. Реализована возможность выборочного сохранения выходных данных. К примеру, вывод только каждого второго значения по оси x , все по оси y и каждый 100-й слой по времени. Это удобно для сравнения полученных результатов при расчетах на разных сетках, а также позволяет существенно сэкономить место на жестком диске.

Для визуализации результатов вычислительных экспериментов использовались две программы: Gnuplot и Tecplot 360. Gnuplot не оснащен графическим интерфейсом и представляет собой консоль, куда последовательно вводятся параметры строящегося изображения, точки, по которым строится график, и команды построения. Автором диссертации был написан конвертер, позволяющий извлекать из файлов определенные данные и записывать их в порядке, позволяющем строить графики нужной проекции в определенный момент времени (к примеру, распределение функции вдоль оси x при $y=0$ в момент времени 100). Исходные файлы с результатами моделирования записывались таким образом, что при их загрузке в Gnuplot строилось 2D GIF изображение, показывающая динамику процесса по времени.

Позже формат вывода был адаптирован под работу с пакетом Tecplot 360 (рис. 2.9.2). Это более мощное средство визуализации с графическим интерфейсом, позволяющее строить

изображения, в том числе в разных проекциях, без необходимости дополнительной обработки выходных данных, а также позволяющее создавать видео для анализа динамики процессов.

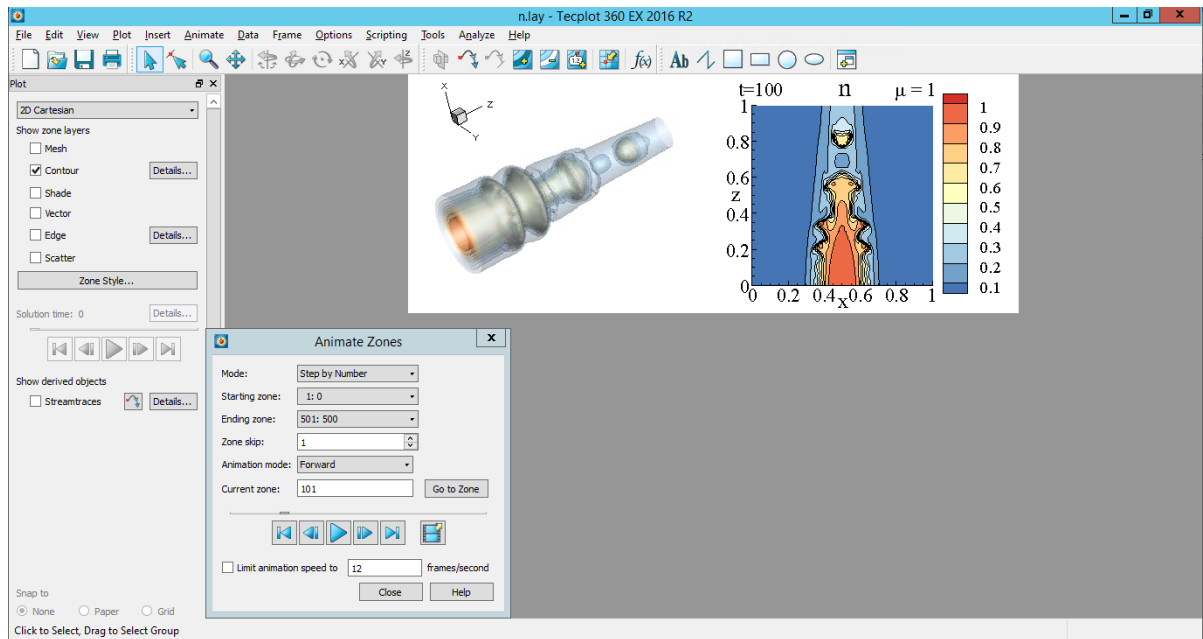


Рис. 2.9.2. Интерфейс программы Tecplot 360.

§2.10. Краткие выводы

В данной главе построены разностные схемы для 2D и 3D задач взаимодействия лазерного импульса с полупроводником, в том числе для модели с учетом продольной дифракции светового импульса, и предложен многоэтапный итерационный процесс для их реализации. Доказаны консервативность схем и консервативность на итерациях, исследован порядок аппроксимации. Получены некоторые оценки разностного решения, показана сходимость итерационного процесса. Также для рассматриваемых задач записаны схемы на основе метода расщепления и исследована их консервативность.

Построены разностные схемы для нахождения начального распределения характеристик полупроводника, находящегося во внешнем электрическом поле.

Для решения задачи Неймана для уравнения Пуассона обсуждено применения прямых и итерационных методов и продемонстрирована связь разрешимости задачи с консервативностью разностной схемы.

Глава 3. Численное исследование эффективности построенных разностных схем для решения задачи взаимодействия оптического импульса с полупроводником

Для оценки эффективности схем помимо аналитического исследования, представленного в главе 2, большую роль играют результаты компьютерного моделирования. Так как аналитические решения для данной задачи отсутствуют, то для оценки точности решения, полученного с помощью компьютерного моделирования, необходимо использовать специальные критерии. В данной главе для верификации численных методов проводится оценка точности сохранения инварианта (выполнения требования консервативности) и сохранение симметрии решения при соответствующих начальных и граничных условиях. Нарушение этих характеристик может быть вызвано отсутствием у метода асимптотической устойчивости, что приводит к накоплению вычислительных ошибок и существенному отклонению разностного решения при проведении расчетов на больших временных интервалах. Для выявления данных ошибок проводятся вычисления на сгущающихся сетках, а также сравнение численных решений, полученных при расчете с использованием различных численных методов. Очевидно, что на практике следует отдавать предпочтение методам, позволяющим проводить расчеты с более крупными шагами по пространственной и временной сеткам. Это существенно уменьшает вычислительную стоимость расчетов, что, несмотря на использование высокопроизводительных компьютеров, имеет принципиальное значение при компьютерном моделировании многомерных нестационарных задач.

§3.1. Сравнение эффективности разностных схем для решения 2D задачи генерации полупроводниковой плазмы

Для численного решения исследуемой задачи в 2D постановке в работе применяются и сравниваются три разностные схемы: схема на основе метода расщепления (2.4.30) – (2.4.33) (MP), модифицированный метод расщепления с итерациями (2.4.36) – (2.4.37) (ММР), и консервативная разностная схема (2.1.9) – (2.1.13), реализованная с помощью двухэтапного итерационного процесса (2.4.2) – (2.4.11) (ДЭИП). Исследование эффективности данных

подходов проводились на примере модели концентрационной ОБ (с коэффициентом поглощения (1.1.7)) при следующих параметрах системы (2.1.9) – (2.1.13):

$$\begin{aligned} \gamma = 10^3, \quad \kappa_x = \kappa_y = 10^{-5}, \quad \delta_0 = 2, \quad q_0 = 1.5, \quad n_0 = 0.01, \quad \mu_x = \mu_y = 1, \\ \psi = 2.553, \quad \xi = 3, \quad \tau_R = 1, \quad a_x = 0.1, \end{aligned} \quad (3.1.1)$$

на сетке $L_x = L_y = 1, h_x = h_y = 0.01$.

Применялся критерий остановки двухэтапного итерационного процесса (2.4.12) с параметрами: $\varepsilon_1 = 10^{-6}, \varepsilon_2 = 10^{-8}$.

Для решения уравнения Пуассона используется метод переменных направлений (2.8.5) – (2.8.6) с итерационным параметром $\tau_p = 10^{-4}$ и условием сходимости, основанном на оценке относительной погрешности (2.8.7) при $\varepsilon_3 = 10^{-5}, \varepsilon_4 = 10^{-7}$.

При работе над параграфом использовались материалы из публикации автора [A9].

3.1.1. Численное исследование консервативности построенных разностных схем на основе компьютерного моделирования

Сравним точность сохранения инварианта, при использовании для расчетов описанных выше разностных методов. Из рис. 3.1.1 следует, что МР (2.4.30) – (2.4.33) не является консервативным – значение инварианта (2.1.16) растет со временем. Таким образом, данный метод не обеспечивает выполнения разностного аналога закона сохранения заряда. В то же время значения инварианта при использовании ММР (2.4.36) – (2.4.37) и ДЭИП (2.4.2) – (2.4.11) сохраняются с высокой точностью при расчете до 1000 безразмерных единиц по времени (значение инварианта близко к нулю, что соответствует поставленным граничным условиям). Очевидно, что при численном моделировании даже при использовании консервативных схем инвариант сохраняется с некоторой погрешностью, определяемой порядком аппроксимации разностной схемы. Стоит отметить, что исследуемые схемы аппроксимируют исходную задачу со вторым порядком по пространству, а расчет производится на сетке с шагом $h_x = h_y = 0.01$. Таким образом при расчете допускаются ошибки порядка 10^{-4} . Рост же значений инварианта при численном моделировании может говорить как о нарушении свойства консервативности разностной схемы, так и об отсутствии у метода асимптотической устойчивости.

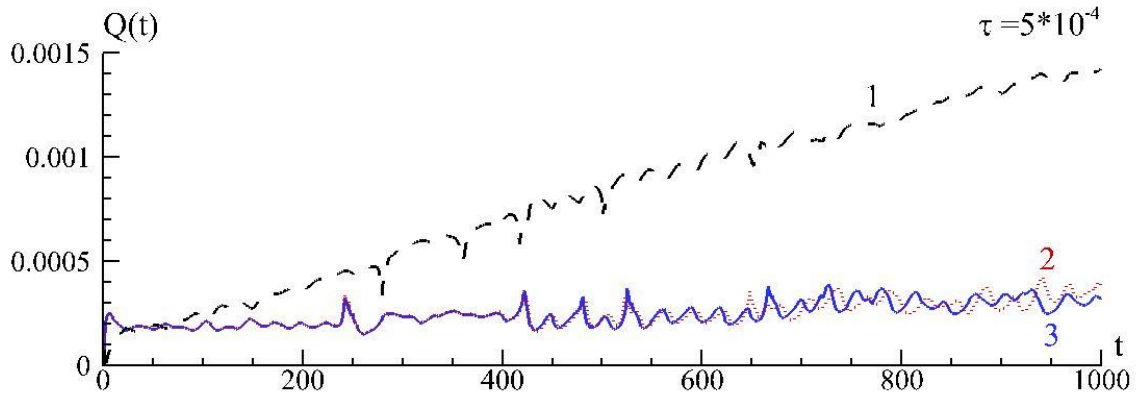


Рис. 3.1.1. Эволюция инварианта $Q(t)$, рассчитанного с шагом $\tau = 5 \cdot 10^{-4}$ с применением МР (1, черная линия, пунктир), МРИ (2, красная линия, точки) и ДЭИП (3, синяя сплошная линия).

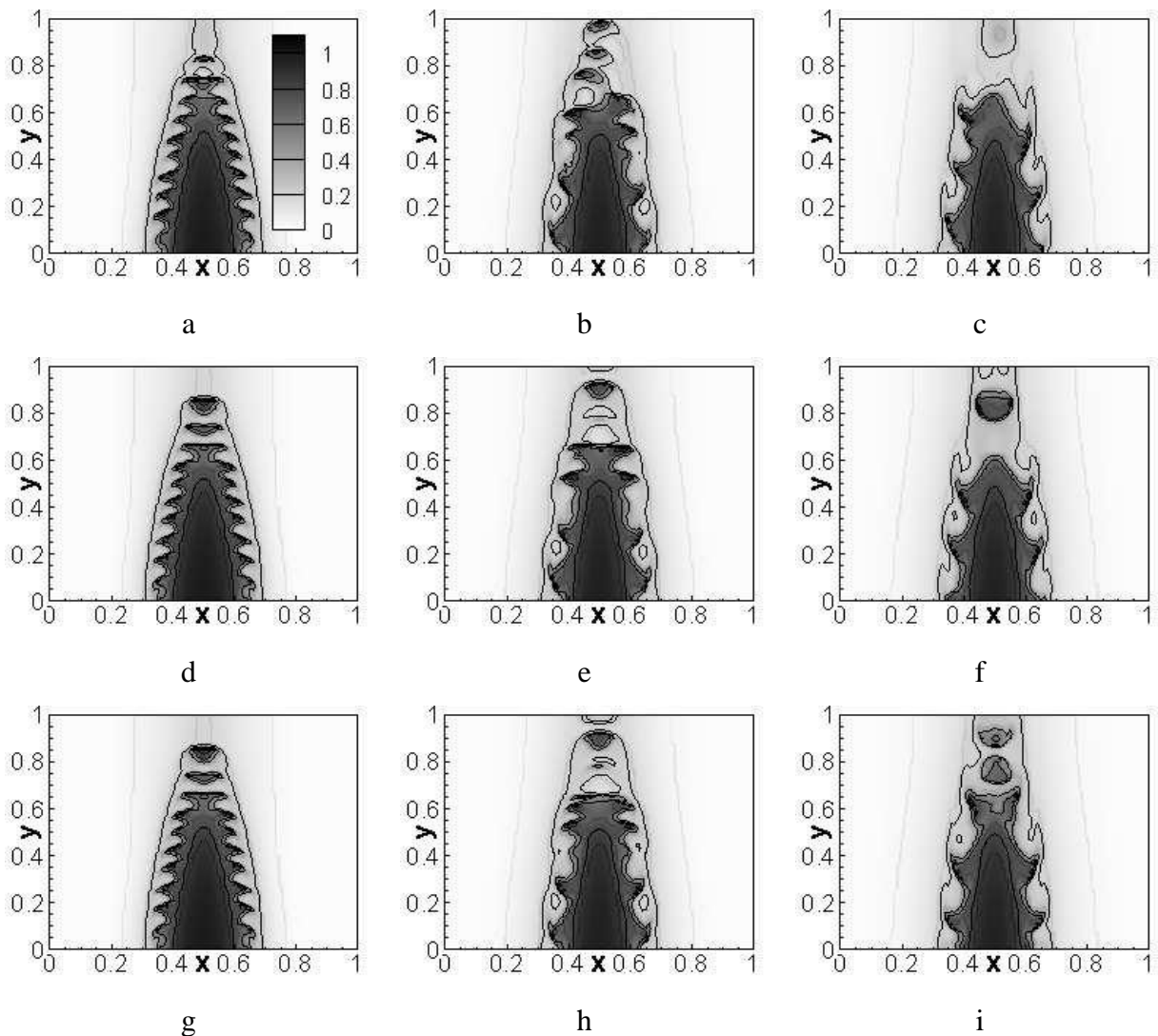
3.1.2. Исследование асимптотической устойчивости разностных схем и сохранение симметричности начального распределения функций на основе компьютерного моделирования

Лазерное излучение на входе в полупроводник задается в виде Гауссова пучка (1.1.10), симметричного относительно центра полупроводника по оси x , поэтому, в случае отсутствия внешнего электрического поля, решение задачи (распределения характеристик полупроводника) должно также иметь симметричное распределение по этой координате в любой момент времени.

На рис. 3.1.2 представлены распределения концентрации свободных электронов в моменты времени $t=200, 500, 950$, полученные с применением различных методов и с разными шагами по времени. Из данного рисунка следует, что до некоего момента времени все методы дают схожий результат. Однако, решения, полученные на основе МР и ММР, со временем становятся несимметричными (рис. 3.1.2 b, e, h). При этом уменьшение шага по времени без изменения шага по пространству для МР начиная с некоторого временного слоя приводит к аномальному росту числа итераций (более 400), необходимых для сходимости МР (2.8.5) – (2.8.6) при решении уравнения Пуассона. В этом случае можно говорить об отсутствии сходимости данного итерационного процесса. Проблема может быть решена соответствующим измельчением пространственных сеток, но, очевидно, что это делает использование данного метода нецелесообразным с точки зрения вычислительных затрат.

Следовательно, МР и его модификация не обладают свойством асимптотической устойчивости и для получения разностного решения с высокой точностью на больших временных интервалах требуется использование разностных сеток с маленькими шагами.

При использовании для расчетов ДЭИП распределение концентрации $n(x, y, t)$ не только сохраняет симметричность на всем временном интервале, на котором решается задача, но и позволяет использовать более крупные шаги разностных сеток, без потери точности решения. Как видно из сравнения рис. 3.1.2 (j, k, l) и рис. 3.1.2 (m, n, o), результаты расчетов с шагами $\tau = 10^{-3}$ и $\tau = 5 \cdot 10^{-4}$ совпадают. При использовании ММР результаты расчетов совпадают с результатами, полученными с использованием ДЭИП, на большом временном интервале, если уменьшить шаг по времени. (рис. 3.1.2 e, h, k). Таким образом, можно утверждать, что ДЭИП обладает асимптотической устойчивостью и консервативностью, которые обеспечивают возможность проведения расчетов с более крупными шагами разностной сетки без потери точности решения. Это является важным преимуществом ДЭИП перед МР и ММР.



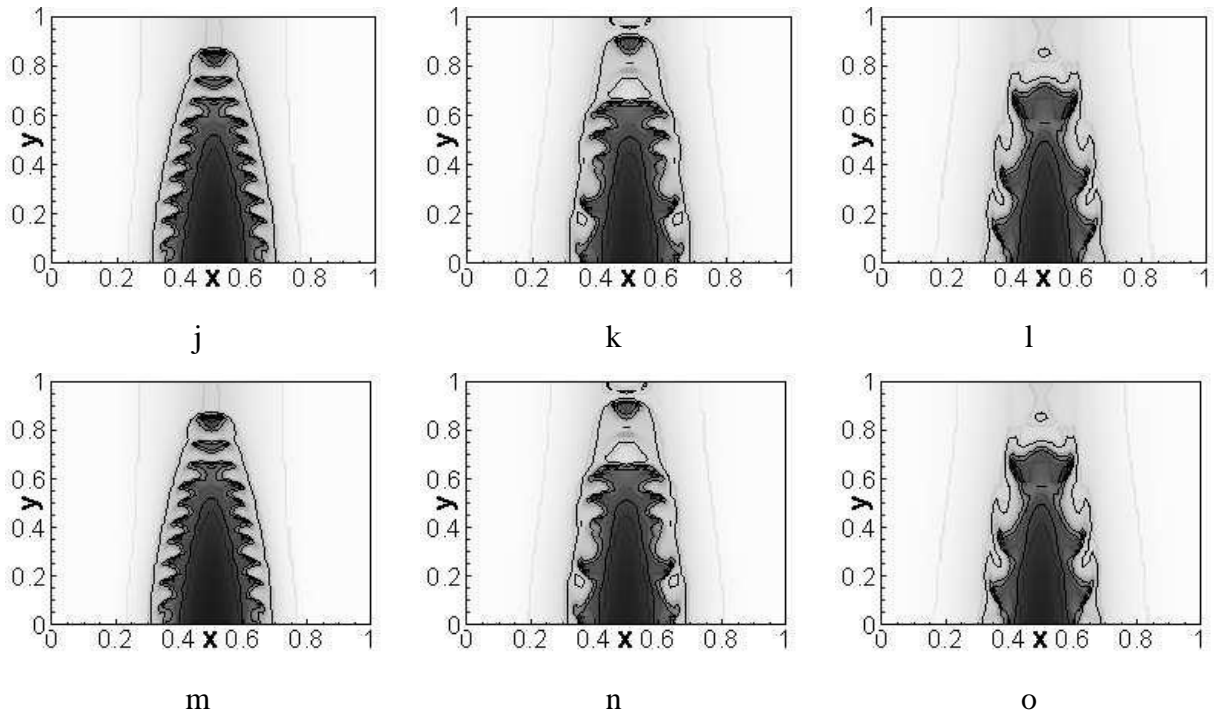


Рис. 3.1.2. Распределение концентрации свободных электронов $n(x, y)$, рассчитанное с помощью МР с шагом $\tau = 10^{-3}$ (a, b, c), ММР с шагом $\tau = 10^{-3}$ (d, e, f) и $\tau = 5 \cdot 10^{-4}$ (g, h, i), ДЭИП с шагом $\tau = 10^{-3}$ (j, k, l) и $\tau = 5 \cdot 10^{-4}$ (m, n, o) в моменты времени $t = 200$ (a, d, g, j, m), $t = 500$ (b, c, h, k, n), $t = 950$ (c, f, i, l, o).

3.1.3. Влияние точности вычисления потенциала электрического поля на решение нестационарной задачи генерации полупроводниковой плазмы. Выбор критерия сходимости итерационного процесса

При решении эволюционной задачи (2.4.2) – (2.4.11) важное значение имеет точность вычисления потенциала лазер-индуцированного электрического поля. Рассмотрим приведенные в таблице 3.1.1 значения максимума модуля невязки $|\Psi(\varphi)|$ (2.8.8), полученные при решении задачи разными методами (для оценки сходимости МПН (2.8.5) – (2.8.6) используется критерий (2.8.7)). При использовании ДЭИП значение невязки $|\Psi(\varphi)|$ близко к нулю и увеличивается со временем незначительно (до порядка 10^{-4}). Более того, значение невязки достигает своего максимума в некоторый момент времени и в дальнейшем это значение может уменьшиться или колебаться в небольших пределах в зависимости от реализации в системе оптический импульс – полупроводник стационарного или квазистационарного режима.

Также из таблицы 3.1.1 следует, что МР не сохраняет невязку $|\Psi(\varphi)|$. При использовании ММР значение $|\Psi(\varphi)|$ так же увеличивается со временем, однако гораздо медленнее чем при использовании МР. Для методов расщепления реализуется прямая зависимость величины невязки от шага по времени: при уменьшении шага τ в два раза (с 10^{-3} до $5 \cdot 10^{-4}$) невязка также уменьшается в два раза. Таким образом, уменьшив шаг по времени для ММР до $5 \cdot 10^{-6}$, на временном отрезке до $t=1$ можно получить невязку того же порядка, что и при использовании ДЭИП с шагом 10^{-3} . Однако, такое уменьшение шага приводит к существенному увеличению расчетного времени. Заметим, что рост значения невязки и степень нарушения симметрии решения находятся в прямой зависимости (рис. 3.1.2).

Таблица 3.1.1. Значения максимума модуля невязки $|\Psi(\varphi)|$ в момент времени t при расчете с шагом τ методами МР, ММР и ДЭИП.

	$t = 0.1$	$t = 0.5$	$t = 1$	$t = 2$	$t = 100$	$t = 500$	$t = 1000$
$\tau = 10^{-3}$							
МР	0.00071	0.01573	0.061	9.034	33.838	84.907	140.011
ММР	0.00152	0.01798	0.04682	0.14079	0.31716	0.33261	0.33354
ДЭИП	0.000014	0.00012	0.00023	0.00017	0.00018	0.00043	0.00028
$\tau = 5 \cdot 10^{-4}$							
МР	0.00035	0.00786	0.0308	4.58	-	-	-
ММР	0.00075	0.00897	0.02339	0.07026	0.15858	0.16645	0.16833
ДЭИП	0.000007	0.00007	0.00007	0.00013	0.00048	0.00026	0.00015
$\tau = 5 \cdot 10^{-6}$							
ММР	0.000007	0.00009	0.00024	-	-	-	-

Несмотря на продемонстрированные преимущества ДЭИП, дальнейшие вычислительные эксперименты показали, что при определенном наборе параметров возможны небольшие нарушения симметрии и для данной схемы. Связанно это с недостаточно высокой точностью решения уравнения Пуассона (2.1.11). Как видно из рис. 3.1.3 (b, d), при высокой точности расчета ($|\Psi(\varphi)| < 10^{-3}$) распределение концентрации свободных электронов симметрично, но симметрия нарушается, если невязка начинает расти (рис. 3.1.3 а, с). Таким образом, из-за нелинейной связи в системе уравнений (2.1.9) – (2.1.12) недостаточная точность при вычислении потенциала электрического поля может привести к нарушению симметрии решения задачи.

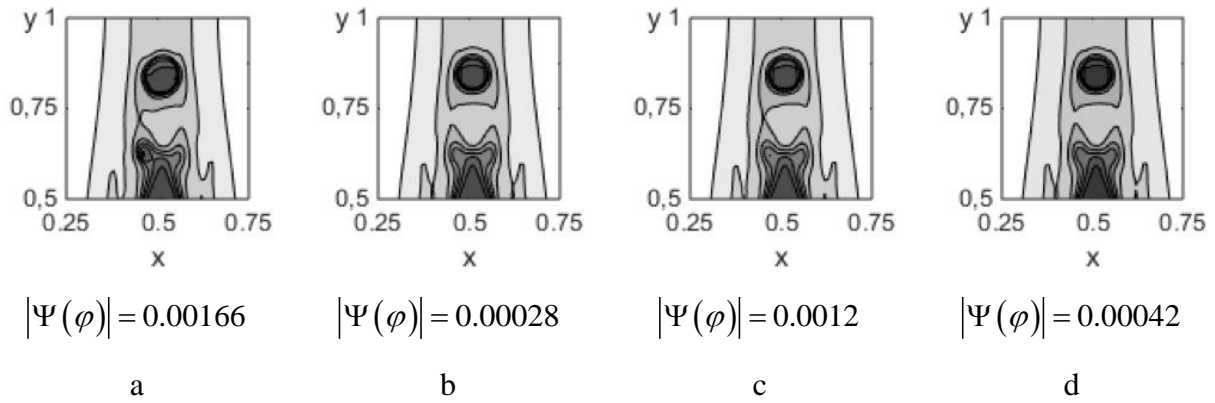


Рис. 3.1.3. Распределение концентрации свободных электронов в момент времени $t = 1000$, рассчитанное с помощью ДЭИП с критерием (2.8.7) при $\varepsilon_3 = 10^{-3}$, $\varepsilon_4 = 10^{-5}$ (а), $\varepsilon_3 = 10^{-5}$, $\varepsilon_4 = 10^{-7}$ (б) и с критерием (2.8.8) при $\varepsilon_5 = 5 \cdot 10^{-3}$ (с), $\varepsilon_5 = 10^{-3}$ (д).

Перейдем к оценке числа итераций, необходимых для удовлетворения критериев сходимости (2.8.7) и (2.8.8). Из данных, представленных в таблице 3.1.2 нетрудно увидеть, что при более слабом критерии ($\varepsilon_3 = 10^{-3}$, $\varepsilon_4 = 10^{-5}$; $\varepsilon_5 = 5 \cdot 10^{-3}$) МПН (2.8.5) – (2.8.6) сходится за небольшое число итераций, а невязка имеет порядок 10^{-3} - 10^{-4} при использовании любого из данных критериев. При уменьшении значений параметров ε_3 , ε_4 на два порядка имеет место заметный рост числа итераций по сравнению с использованием критерия (2.8.8) для $\varepsilon_5 = 10^{-3}$, при этом невязка в обоих случаях имеет порядок 10^{-4} . Таким образом, для нахождения решения на одном временном слое при использовании критерия (2.8.7) требуется выполнить гораздо больше итераций и, соответственно, вычислительных затрат, без существенного увеличения точности расчетов, по сравнению с использованием критерия (2.8.8). Следует отметить, что для рассматриваемого набора параметров независимо от выбора критерия для сходимости метода переменных направлений (2.8.5) – (2.8.6) требуется несколько итераций только на первом этапе двухэтапного итерационного процесса (2.4.2) – (2.4.6). На втором этапе (2.4.7) – (2.4.11) он сходится за одну итерацию.

Таблица 3.1.2. Значение невязки $|\Psi(\varphi)|$ для первого (2.4.2) – (2.4.6) и второго (2.4.7) – (2.4.11) этапа ДЭИП и число итераций N_p , необходимое для удовлетворения критерия остановки метода переменных направлений (2.8.5) – (2.8.6) в разные моменты времени.

Критерий	$ f^{p+1} - f^p < f^p \varepsilon_3 + \varepsilon_4$	$ \Lambda f^{p+1} - \gamma(\hat{n}^{s+1} - \hat{N}^{s+1}) < \varepsilon_5$
----------	---	---

Параметры	$\varepsilon_3 = 10^{-3},$ $\varepsilon_4 = 10^{-5}$	$\varepsilon_3 = 10^{-5},$ $\varepsilon_4 = 10^{-7}$	$\varepsilon_5 = 5 \cdot 10^{-3}$	$\varepsilon_5 = 10^{-3}$
$t = 1$				
1 Этап $(\Psi(\varphi) , N_p)$	$(6.5 \cdot 10^{-4}, 1)$	$(10^{-4}, 10)$	$(1.5 \cdot 10^{-3}, 1)$	$(6.5 \cdot 10^{-4}, 1)$
2 Этап $(\Psi(\varphi) , N_p)$	$(5.8 \cdot 10^{-4}, 1)$	$(1.2 \cdot 10^{-4}, 1)$	$(1.5 \cdot 10^{-3}, 1)$	$(5.8 \cdot 10^{-4}, 1)$
$t = 10$				
1 Этап $(\Psi(\varphi) , N_p)$	$(2 \cdot 10^{-2}, 1)$	$(5.2 \cdot 10^{-4}, 26)$	$(3.3 \cdot 10^{-3}, 3)$	$(9 \cdot 10^{-4}, 7)$
2 Этап $(\Psi(\varphi) , N_p)$	$(8.1 \cdot 10^{-3}, 1)$	$(5.6 \cdot 10^{-4}, 1)$	$(3 \cdot 10^{-3}, 1)$	$(8.2 \cdot 10^{-4}, 1)$
$t = 100$				
1 Этап $(\Psi(\varphi) , N_p)$	$(3.8 \cdot 10^{-2}, 1)$	$(3.3 \cdot 10^{-4}, 20)$	$(3.4 \cdot 10^{-3}, 3)$	$(9.7 \cdot 10^{-4}, 6)$
2 Этап $(\Psi(\varphi) , N_p)$	$(6.3 \cdot 10^{-3}, 1)$	$(2.1 \cdot 10^{-4}, 1)$	$(3.5 \cdot 10^{-3}, 1)$	$(7.3 \cdot 10^{-4}, 1)$
$t = 1000$				
1 Этап $(\Psi(\varphi) , N_p)$	$(2.8 \cdot 10^{-2}, 1)$	$(3.3 \cdot 10^{-4}, 13)$	$(2.1 \cdot 10^{-3}, 3)$	$(7.3 \cdot 10^{-4}, 6)$
2 Этап $(\Psi(\varphi) , N_p)$	$(5.4 \cdot 10^{-3}, 1)$	$(3.1 \cdot 10^{-4}, 1)$	$(1.5 \cdot 10^{-3}, 1)$	$(5.7 \cdot 10^{-4}, 1)$

Ввиду существования нелинейной зависимости между характеристиками полупроводника точность вычисления потенциала электрического поля может критически повлиять на решение всей системы (2.1.9) – (2.1.13). Как показано выше, выбор критерия сходимости для метода переменных направлений (2.8.5) – (2.8.6) является важным вопросом, определяющим как точность полученного решения, так и объем вычислительных затрат необходимых для нахождения решения на каждом временном слое с заданной точностью.

Полученные результаты компьютерного моделирования показали, что при определенных параметрах $\varepsilon_3, \varepsilon_4, \varepsilon_5$ можно получить одинаковые значения распределения потенциала электрического поля, используя как критерий (2.8.7), так и критерий (2.8.8). Однако, использование критерия (2.8.8) позволяет оптимизировать вычислительные затраты: завершить итерационный процесс за меньшее число итераций без потери точности решения уравнения Пуассона. Тем не менее, данный критерий плохо работает для разностных схем, не обладающих асимптотической устойчивостью (МР и ММР с итерациями), т. к. в следствие накопления вычислительных ошибок значение невязки растет со временем и в некоторый момент ее значение может превысить значение ε_5 , что приведет к невозможности выполнения критерия (2.8.8).

§3.2. Исследование влияния точности вычисления начального распределения характеристик полупроводника и выбора нормировки потенциала лазеро-индуцированного поля на численное решение рассматриваемых задач

При работе над параграфом использовались материалы из публикации автора [А10].

3.2.1. Влияние точности вычисления начального распределения характеристик полупроводника на решение нестационарной задачи генерации полупроводниковой плазмы

Рассмотрим влияние точности вычисления начального распределения характеристик полупроводника на решение нестационарной задачи взаимодействия лазерного излучения с полупроводником (2.1.9) – (2.1.13) для расчета с параметрами (3.1.1). На рис. 3.2.1 представлено распределение концентрации свободных электронов полупроводника в разные моменты времени при наличии внешнего электрического поля ($E_x = 0, E_y = 8$), действующего вдоль оси y . Для решения задачи о начальном распределении характеристик полупроводника использовалась схема (2.7.1) – (2.7.4) с итерационным параметром $\tau_0 = 10^{-4}$.

Как видно из рис. 3.2.1, если начальное распределение рассчитано с недостаточной точностью (в критерии (2.7.5) используются параметры $(\varepsilon_1^0 = \varepsilon_2^0 = \varepsilon_3^0 = 10^{-2})$), то это приводит к нарушению симметрии решения по оси x . Более того, вычислительные эксперименты показали, что в данном случае при решении нестационарной системы (2.1.9) – (2.1.13) невозможно достичь высокой точности вычисления потенциала электрического поля: значение невязки (2.8.8) возрастает до 0.7 и уменьшить значение невязки в процессе решения нестационарной системы, например при помощи постановки более жесткого критерия для метода переменных направлений (2.8.5) – (2.8.6), не удастся.

Однако, если начальное распределение функций вычислено с более высокой точностью ($\varepsilon_1^0 = \varepsilon_2^0 = \varepsilon_3^0 = 10^{-4}$), то в процессе расчета динамики взаимодействия лазерного импульса с полупроводником значение невязки (2.8.8) не превышает величины порядка 10^{-3} , что обеспечивает достаточную точность для сохранения симметрии распределения концентрации свободных электронов.

Эти результаты демонстрируют существенное влияние точности вычисления начальных распределений характеристик полупроводника на точность решения нестационарной задачи генерации полупроводниковой плазмы.

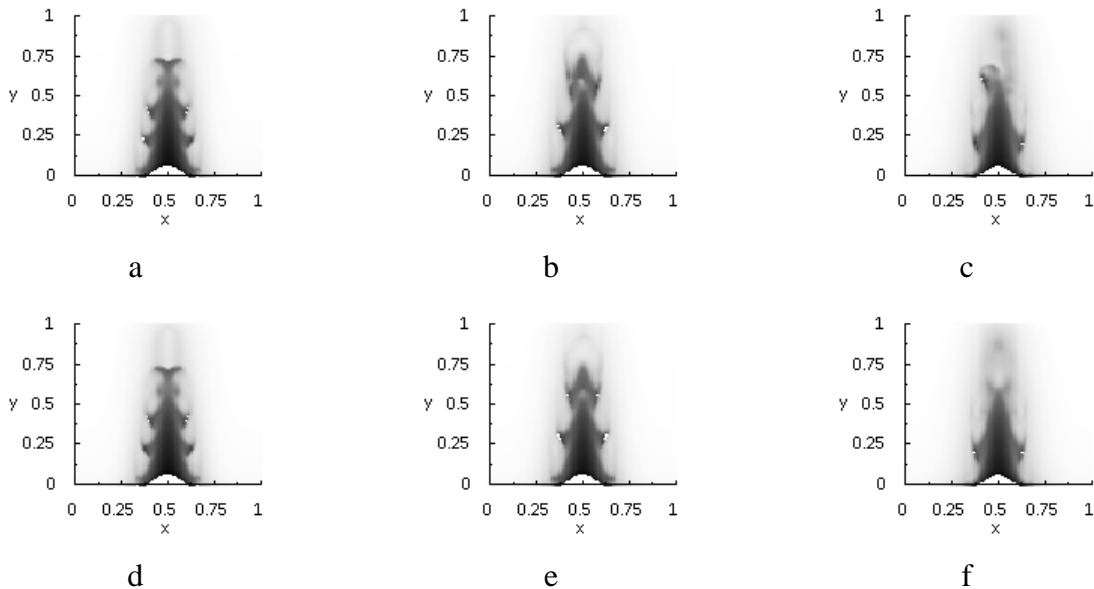


Рис. 3.2.1. Распределение концентрации свободных электронов в случае нахождения полупроводника во внешнем электрическом поле $E_x = 0$, $E_y = 8$ в моменты времени $t = 250$ (а, d), 320 (b, e), 500 (c, f) полученные с использованием начальных значений функций, рассчитанных с разной точностью: $(\varepsilon_1^0 = \varepsilon_2^0 = \varepsilon_3^0 = 10^{-2})$ (a, b, c) и $(\varepsilon_1^0 = \varepsilon_2^0 = \varepsilon_3^0 = 10^{-4})$ (d, e, f).

3.2.2 Влияние нормировки потенциала на численное решение задачи полевой оптической бистабильности

Рассмотрим взаимодействие оптического импульса с полупроводником (1.1.1) – (1.1.4) при зависимости коэффициента поглощения от потенциала лазера-индуцированного электрического поля (1.1.8). Параметры системы заданы следующим образом:

$$\gamma = 10^3, \delta_0 = 2, n_0 = 0.01, \mu_x = \mu_y = 1, \alpha = 0, \beta = 3, \tau_R = 1, a_x = 0.1, L_x = L_y = 1,$$

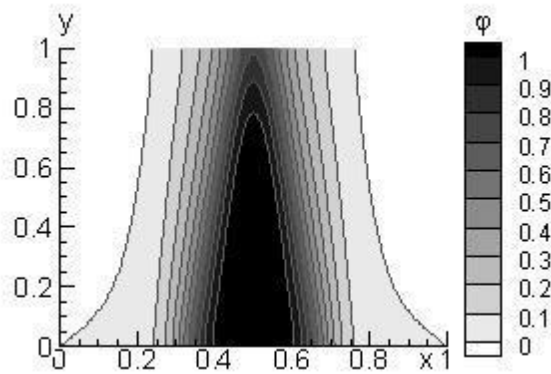
при различных значениях $\kappa_x, \kappa_y, q_0, E_x, E_y$.

Для решения задачи применялся двухэтапный итерационный процесс (2.4.2) – (2.4.12) с критерием сходимости (2.4.12) при $\varepsilon_1 = 10^{-5}, \varepsilon_2 = 10^{-7}$. Для решения уравнения Пуассона использовался (2.8.5) – (2.8.6) с итерационным параметром $\tau_p = 10^{-4}$ и критерием сходимости (2.8.8) при $\varepsilon_5 = 10^{-4}$.

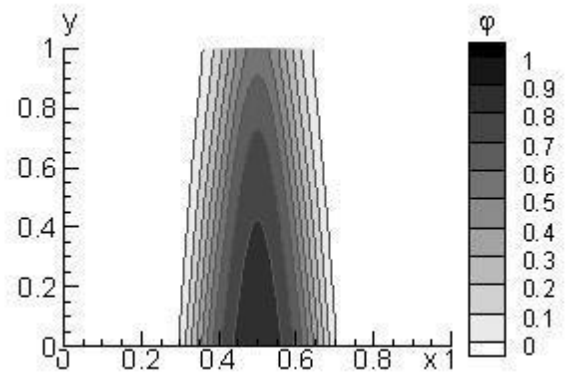
Как уже говорилось в п. 1.3.1, в этом случае решение задачи зависит от нормировки, выбранной для обеспечения единственности решения задачи Неймана для уравнения Пуассона. На рис. 3.2.2 – 3.2.6 представлены сравнения распределений характеристик полупроводника, а также интенсивности оптического импульса (рис. 3.2.2, 3.2.4, 3.2.6), рассчитанные с применением разных критериев нормировки решения задачи Неймана: (2.8.14) и (2.8.16). Как видно из графиков, при значении коэффициентов диффузии $\kappa_x = \kappa_y = 10^{-5}$ (рис. 3.2.2 – проекция x - y ; рис. 3.2.3 – распределение вдоль осей x и y) распределения концентраций свободных электронов и интенсивности лазерного импульса сильно различаются в зависимости от используемой нормировки. При увеличении коэффициента диффузии на два порядка: $\kappa_x = \kappa_y = 10^{-3}$, и уменьшении интенсивности падающего пучка q_0 с 1.5 до 1, различия между решениями, полученными с применением разных нормировок, уменьшились (рис. 3.2.4 проекция x - y ; рис. 3.2.5 распределение вдоль осей x и y). В частности, распределения концентрации

свободных электронов и интенсивности лазерного импульса совпадают, однако отличия в распределении концентрации ионизированных доноров по-прежнему весьма существенны. Следует отметить, что представленные на рис. 3.2.2 – 3.2.5 распределения обладают симметрией вдоль оси x , что соответствует симметричности профиля интенсивности падающего лазерного импульса (1.1.10). Инвариант (2.1.16) сохраняется с достаточно высокой точностью и его максимальное значение при расчетах не превышает значения $2 \cdot 10^{-4}$.

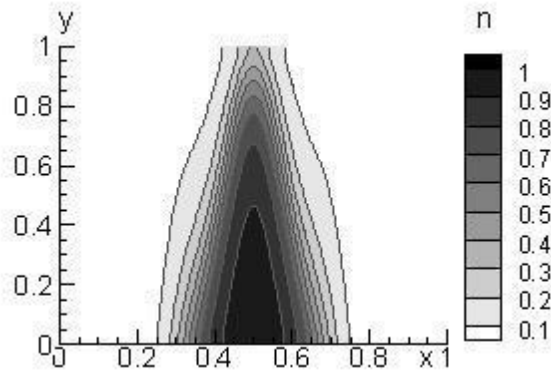
При наличии внешнего электрического поля (рис. 3.2.6) имеет место аналогичная зависимость решений от выбранной нормировки. В данном случае решение не симметрично, что обусловлено наличием внешнего поля, однако влияние выбранной нормировки на размеры области высокой концентрации сохраняется.



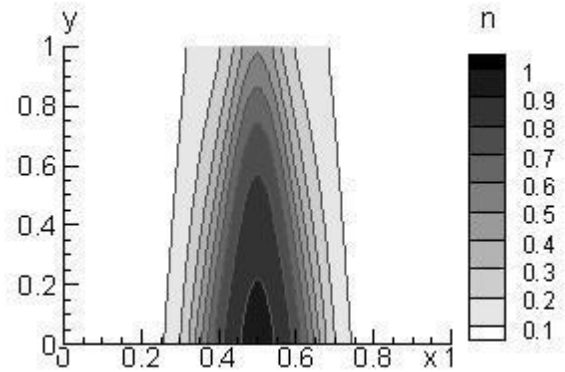
a



b



c



d

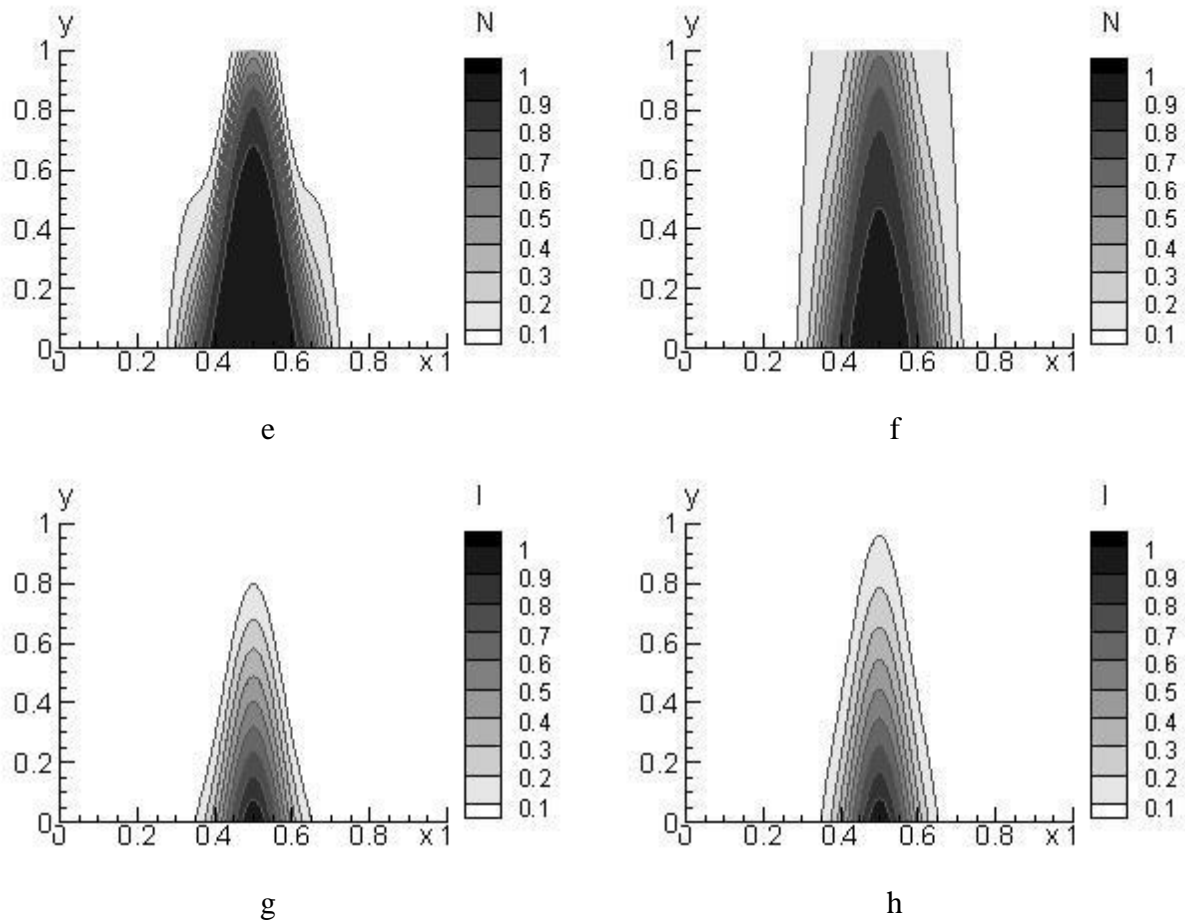
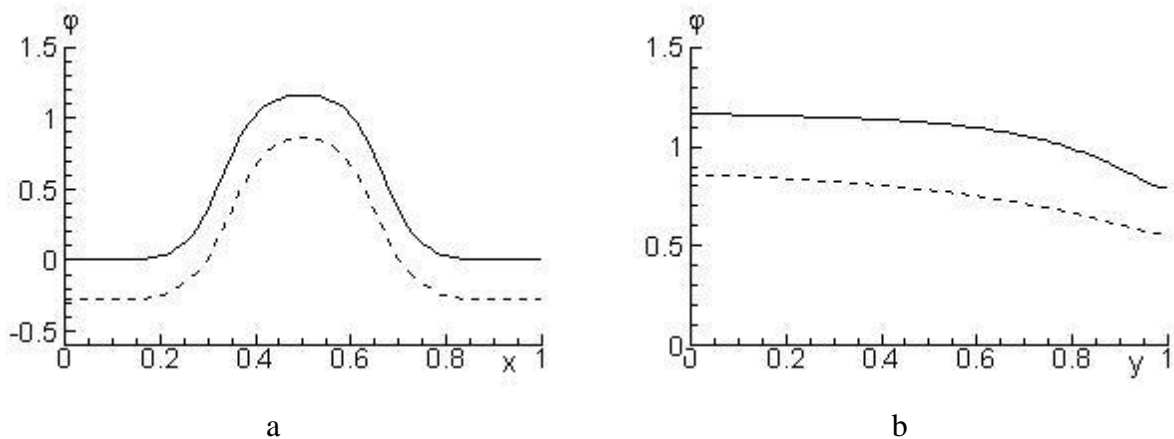


Рис. 3.2.2. Распределение потенциала электрического поля (а, б), концентрации свободных электронов (с, д), концентрации ионизированных доноров (е, ф) и интенсивности лазерного импульса (г, х) в момент времени $t = 200$, рассчитанные с нормировкой (2.8.14) (а, с, е, г) и (2.8.16) (б, д, ф, х) для $\kappa_x = \kappa_y = 10^{-5}$, $q_0 = 1.5$, $E_x = E_y = 0$ на сетке $h_x = h_y = 0.01$, $\tau = 10^{-3}$.



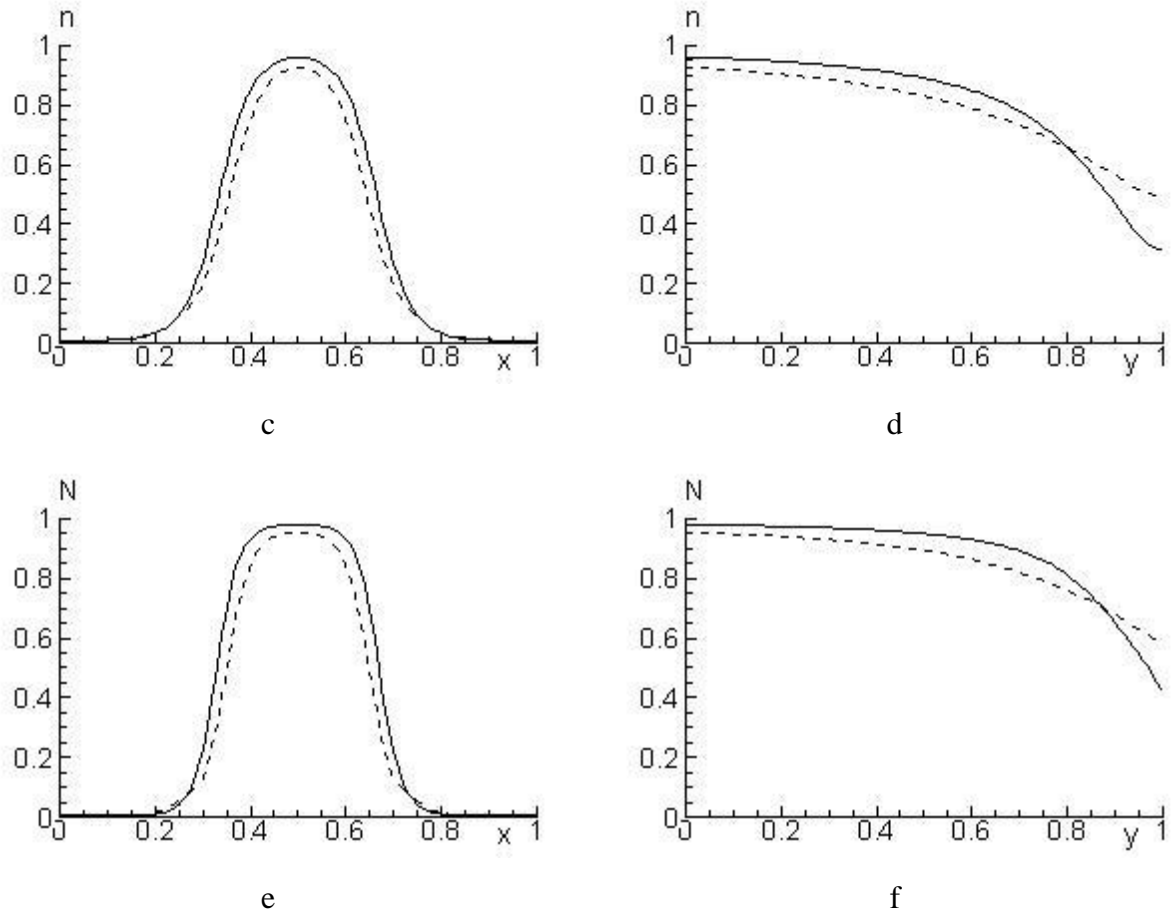
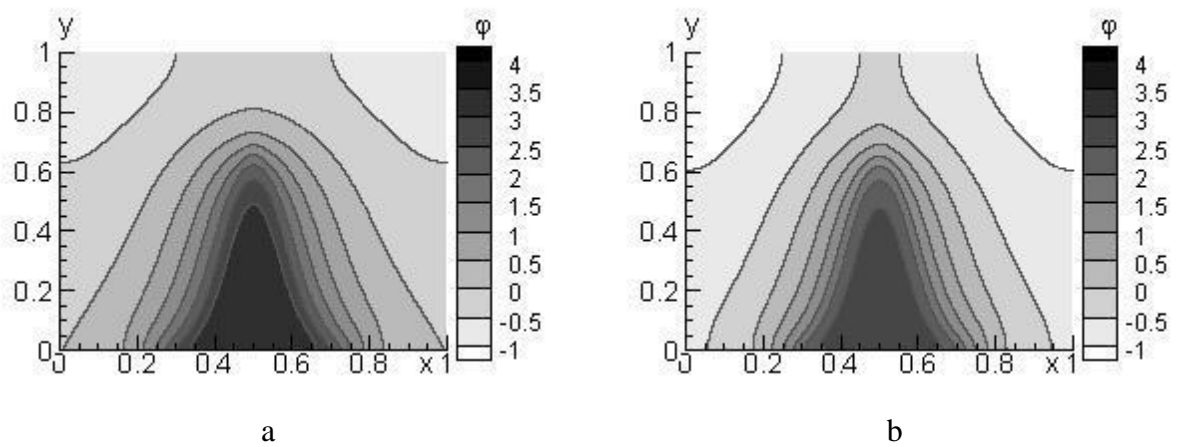


Рис. 3.2.3. Распределение потенциала электрического поля (а, б), концентрации свободных электронов (с, д) и концентрации ионизированных доноров (е, ф) вдоль оси x ($y=0$) (а, с, е) и вдоль оси y ($x=0.5$) (б, д, ф) в момент времени $t=200$ с нормировкой (2.8.14) (сплошная) и (2.8.16) (пунктир) для $\kappa_x = \kappa_y = 10^{-5}$, $q_0 = 1.5$, $E_x = E_y = 0$ на сетке $h_x = h_y = 0.01$, $\tau = 10^{-3}$.



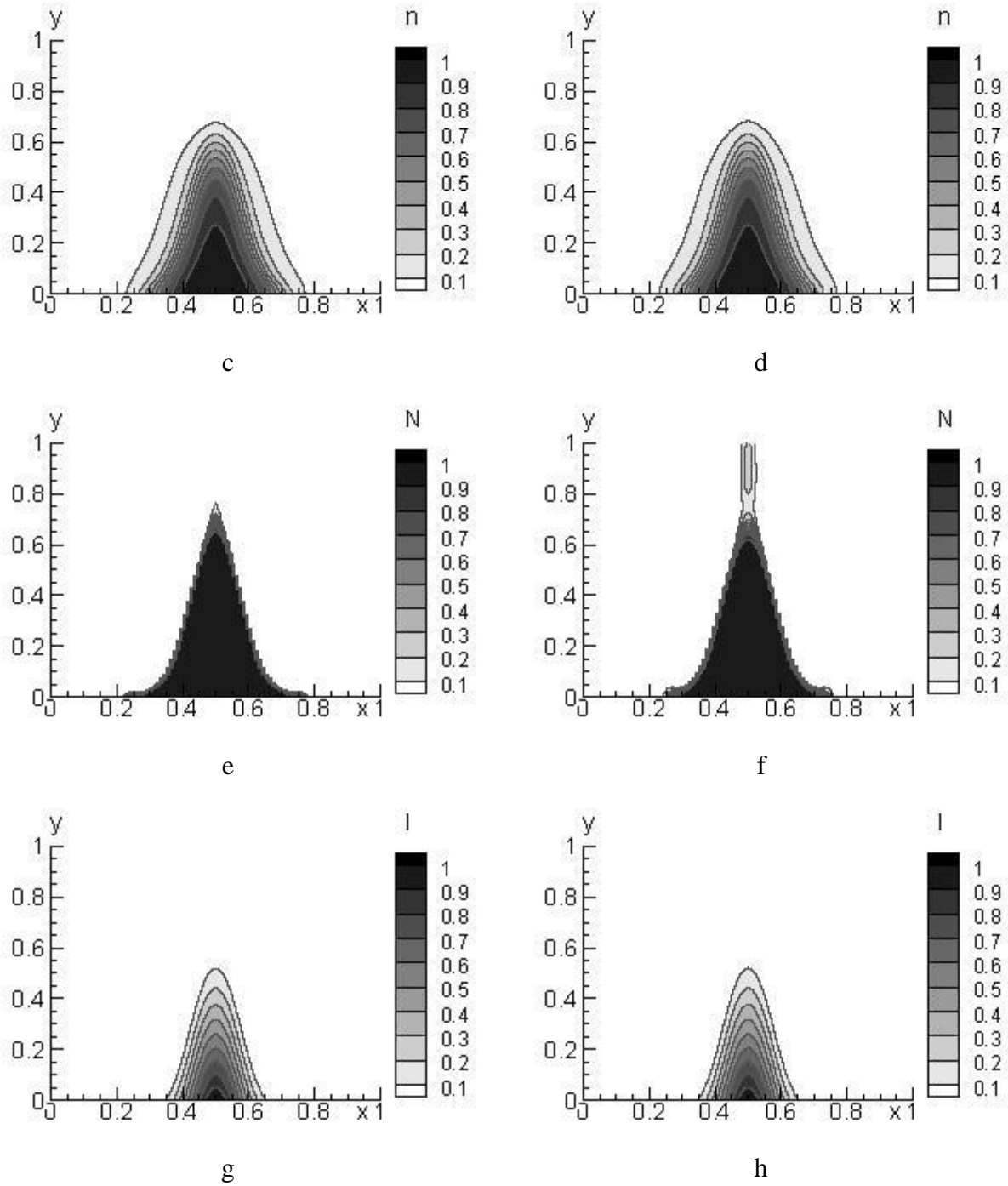


Рис. 3.2.4. Распределение потенциала электрического поля (a, b), концентрации свободных электронов (c, d), концентрации ионизированных доноров (e, f) и интенсивности лазерного импульса (g, h) в момент времени $t=200$, вычисленные с нормировкой (2.8.14) (a, c, e, g) и (2.8.16) (b, d, f, h) для $\kappa_x = \kappa_y = 10^{-3}$, $q_0 = 1$, $E_x = E_y = 0$ на сетке $h_x = 0.01$, $h_y = 10^{-4}$, $\tau = 10^{-4}$.

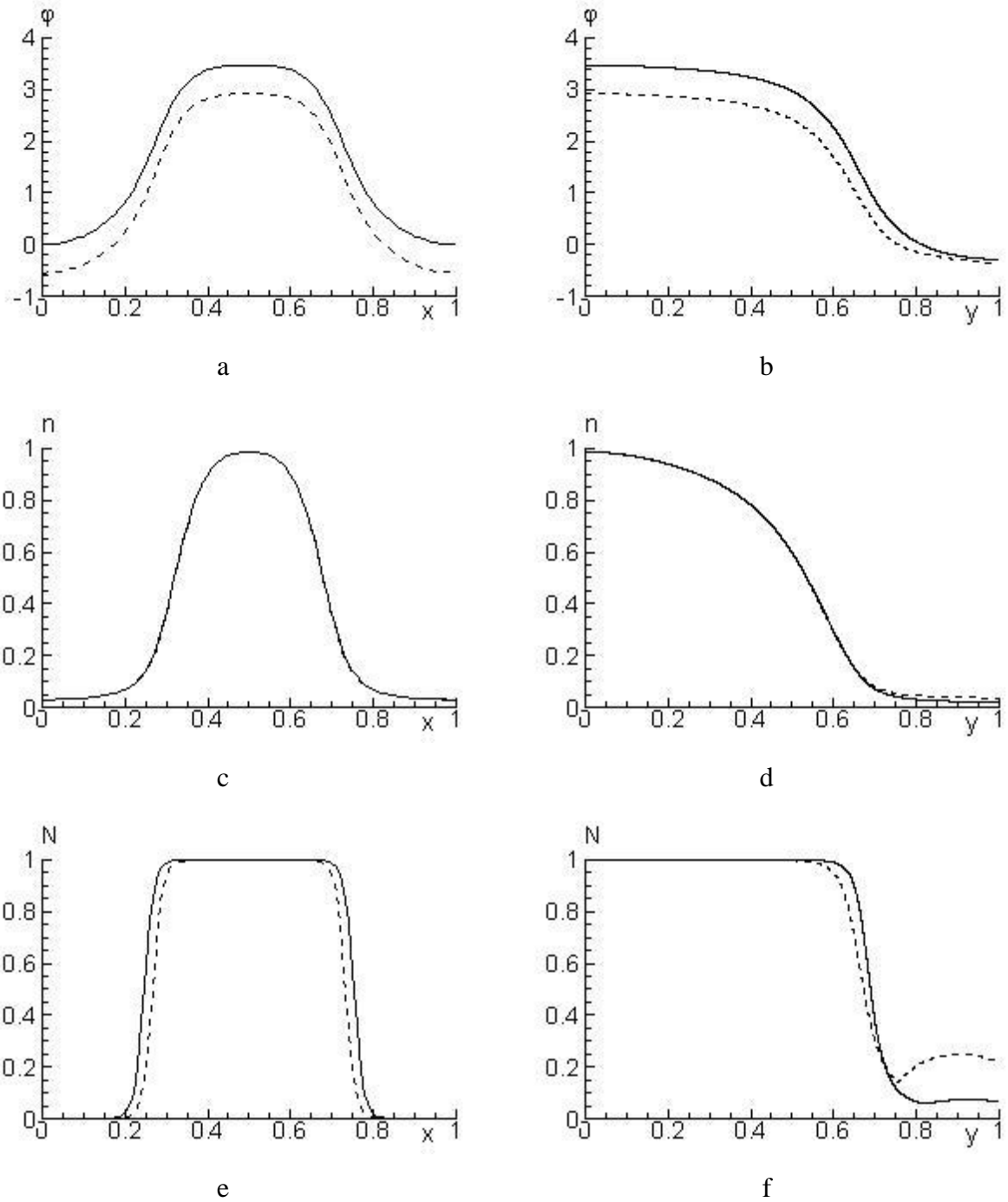
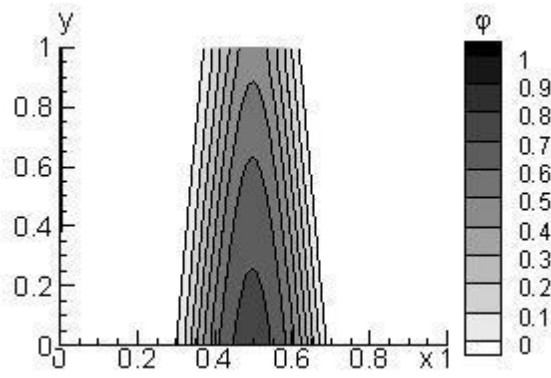
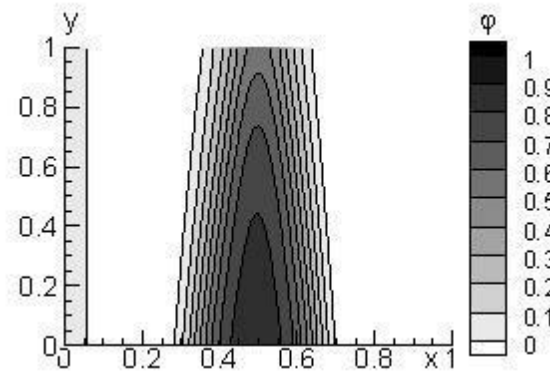


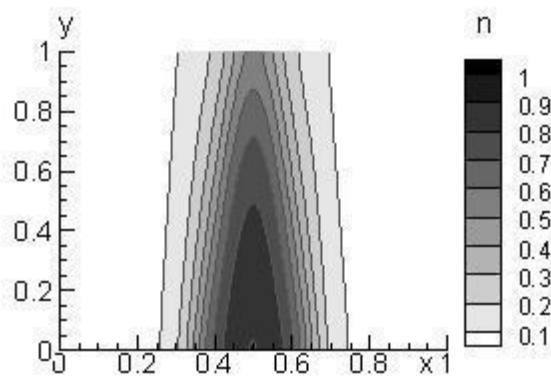
Рис. 3.2.5. Распределение потенциала электрического поля (a, b), концентрации свободных электронов (c, d) и концентрации ионизированных доноров (e, f) вдоль оси x ($y=0$) (a, c, e) и вдоль оси y ($x=0.5$) (b, d, f) в момент времени $t=200$, вычисленные с нормировкой (2.8.14) (сплошная) и (2.8.16) (пунктир) для $\kappa_x = \kappa_y = 10^{-3}$, $q_0 = 1$, $E_x = E_y = 0$ на сетке $h_x = 0.01$, $h_y = 10^{-4}$, $\tau = 10^{-4}$.



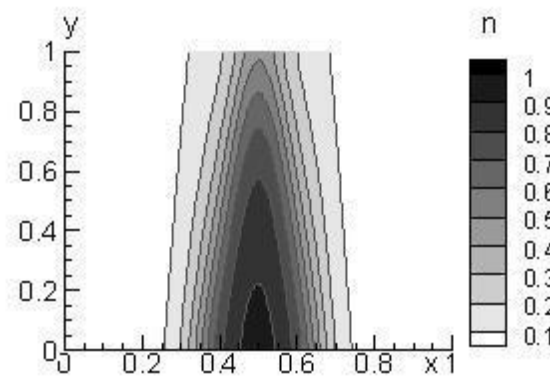
a



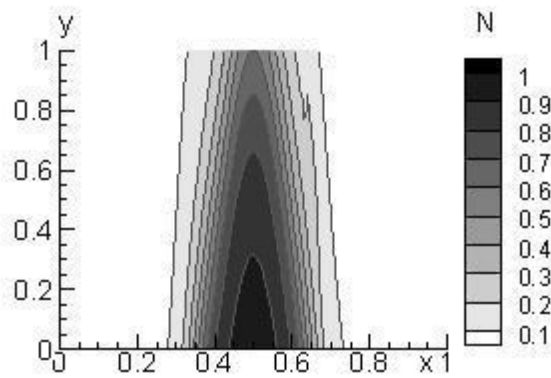
b



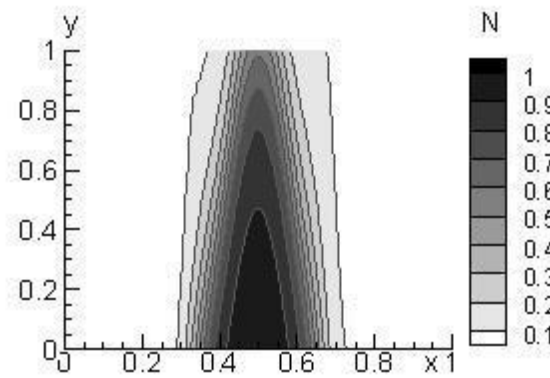
c



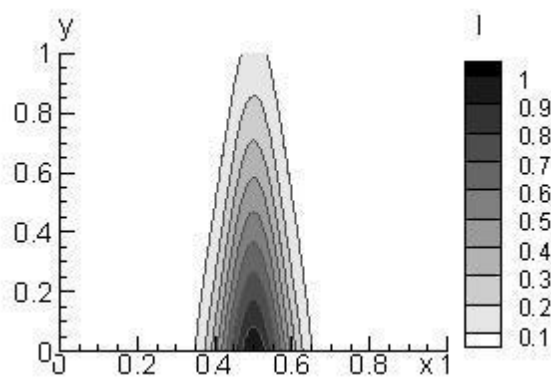
d



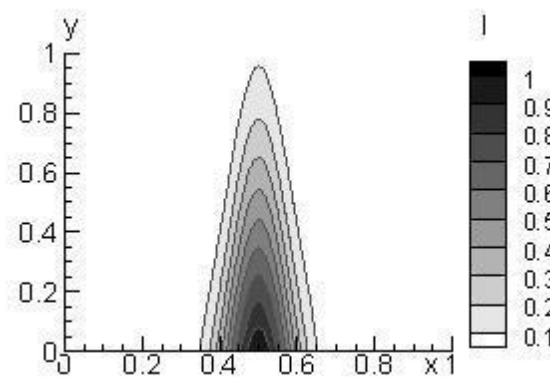
e



f



g



h

Рис. 3.2.6. Распределение потенциала электрического поля (a, b), концентрации свободных электронов (c, d), концентрации ионизированных доноров (e, f) и интенсивности лазерного импульса (g, h) в момент времени $t = 200$, вычисленные с нормировкой (2.8.14) (a, c, e, g) и (2.8.16) (b, d, f, h) для $\kappa_x = \kappa_y = 10^{-5}$, $q_0 = 1.5$, $E_x = 2$, $E_y = 0$ на сетке $h_x = h_y = 0.01$, $\tau = 10^{-3}$.

Как уже говорилось, при реализации ОБ происходит взрывное поглощение световой энергии в полупроводнике, что приводит к переключению системы из одного состояния в другое (из нижнего в верхнее и обратно) при крайне малом изменении интенсивности падающего лазерного импульса. При численном моделировании полевой ОБ выбор нормировки для выделения единственного решения уравнения Пуассона может оказать влияние на форму петли гистерезиса (например, на ширину области бистабильности и интенсивности переключения).

В диссертации не дается оценка того, какой из критериев нормировки (2.8.14) или (2.8.16) предпочтительнее для проведения компьютерного моделирования. Однако представленные результаты демонстрируют существенное влияние выбора подхода к обеспечению единственности вычисления потенциала электрического поля на распределения характеристик полупроводника. Это необходимо учитывать при анализе результатов компьютерного моделирования, полученных с помощью разных программных реализаций, а также при сравнении с экспериментальными данными.

§3.3. О нарушении условия разрешимости при решении прямыми методами задачи Неймана для уравнения Пуассона, включенного в систему нестационарных дифференциальных уравнений и нелинейно связанного с уравнением типа реакция-конвекция-диффузия. Преимущества применения итерационных методов

Перейдем к рассмотрению вопроса об эффективности методов решения задачи Неймана для уравнения Пуассона, которые обсуждались выше в §2.8. Эффективность БДПФ для решения эллиптических задач с различными граничными условиями широко известна: это метод, обладающий высокой точностью и быстродействием. Однако, предметом исследования в данной работе является численное решение нестационарной задачи взаимодействия оптического импульса с полупроводником. Поэтому в данном параграфе рассматривается вопрос о выборе метода решения не отдельно взятого уравнения Пуассона, а включенного в систему

нестационарных дифференциальных уравнений (1.2.1) – (1.2.6). Как говорилось выше, особенностью этой системы является наличие нелинейной обратной связи между потенциалом электрического поля полупроводника и концентрациями заряженных частиц, присутствие которой определяется через подвижность электронов. Это может приводить к искажению правой части уравнения Пуассона и, как следствие, нарушению условия разрешимости задачи Неймана.

Для детального исследования данного вопроса была проведена серия вычислительных экспериментов, в ходе которых для каждого из рассмотренных методов решения задачи (2.3.4) – (2.3.8): ТЭИП (2.6.2) – (2.6.15) и МСП (2.6.46) – (2.6.51), входящее в систему уравнение Пуассона решалось как итерационным методом (2.8.9) – (2.8.10), так и БДПФ.

Все алгоритмы были реализованы в виде компьютерной программы на языке C++. При использовании БДПФ использовалась его реализация в библиотеке Intel MKL. Сравнение результатов, рассчитанных при использовании различных методов, производилось для следующих параметрах системы (2.3.4) – (2.3.8):

$$\gamma = 10^3, \kappa_x = \kappa_y = \kappa_z = 10^{-5}, \delta_0 = 2, q_0 = 1.5, n_0 = 0.01, \tau_R = 1, a_x = a_y = 0.1, \quad (3.3.1)$$

на сетке $L_x = L_y = L_z = 1, h_x = h_y = h_z = 0.01$.

Критерий останова трехэтапного итерационного процесса (2.6.16): $\varepsilon_1 = 10^{-6}, \varepsilon_2 = 10^{-8}$.

Для исследования причины нарушения условия разрешимости задачи Неймана при использовании прямых методов для решения уравнения Пуассона были проведены расчеты без учета конвективного слагаемого в уравнении относительно концентрации свободных электронов (с нулевым значением коэффициентов подвижности $\mu_x = \mu_y = \mu_z = \mu = 0$).

Для концентрационной модели ОБ в (1.1.7) задавались параметры $\psi = 2.553, \xi = 3$; для полевой модели ОБ параметры в (1.1.8) - $\alpha = 0, \beta = 3$. При решении уравнения Пуассона методом стабилизирующей поправки (2.8.9) – (2.8.10) использовался итерационный параметр $\tau_p = 10^{-4}$ и условие сходимости, основанном на значении невязки (2.8.13) при $\varepsilon_5 = 10^{-3}$.

Для оценки решений использовались следующие нормы:

$$\|f\|_C = \max_{\substack{1 \leq l \leq P_x - 1 \\ 1 \leq j \leq P_y - 1 \\ 1 \leq k \leq P_z - 1}} |f|, \quad \|f\|_{L_2} = \left(h_x h_y h_z \sum_{k=1}^{P_z-1} \sum_{j=1}^{P_y-1} \sum_{l=1}^{P_x-1} |f|^2 \right)^{1/2}. \quad (3.3.2)$$

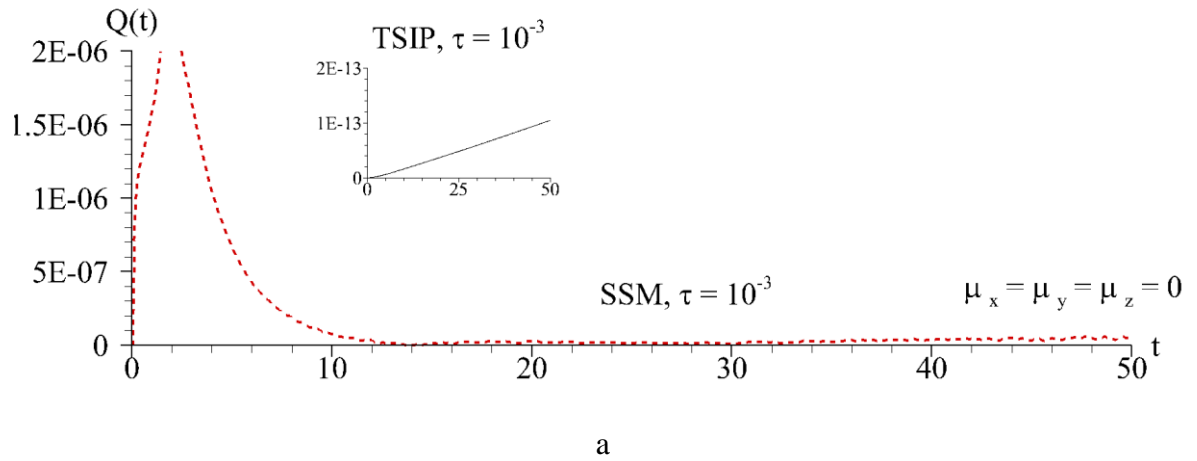
При работе над параграфом использовались материалы из публикаций автора [A11, A13].

3.3.1. Случай однородных граничных условий

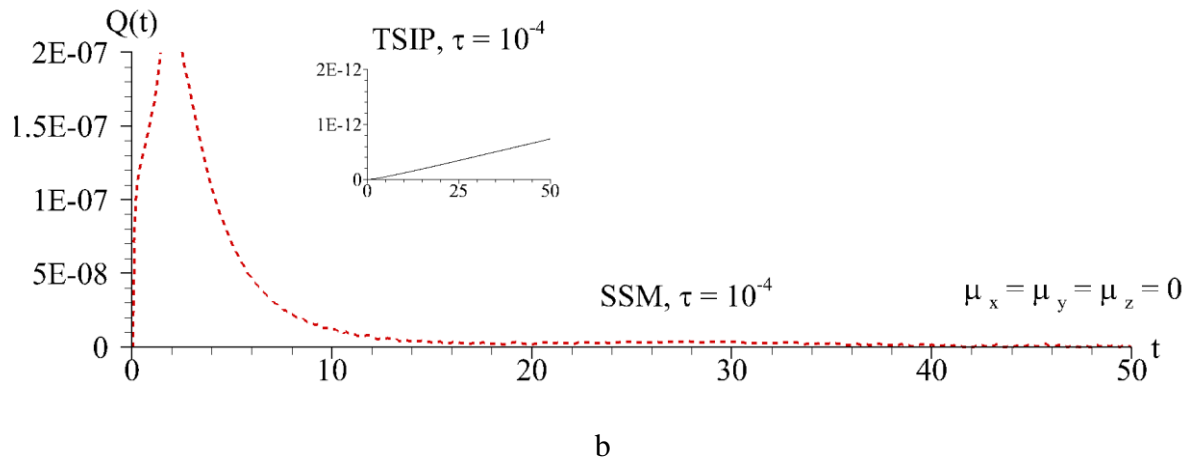
Сначала рассмотрим случай отсутствия внешнего поля, то есть имеют место однородные граничные условия Неймана: $E_x = E_y = E_z = 0$. Для концентрационной модели (1.1.7) при нулевой подвижности свободных электронов $\mu_x = \mu_y = \mu_z = \mu = 0$ нелинейная обратная связь между потенциалом электрического поля и концентрацией свободных электронов отсутствует. В результате, выбор метода решения уравнения Пуассона (2.3.6), входящего в систему нелинейных уравнений (2.3.4) – (2.3.7), не влияет на решение остальных уравнений, входящих в данную систему.

На рис. 3.3.1 представлены распределения инварианта (2.3.11), рассчитанные с помощью ТЭИП (2.6.2) – (2.6.15) (на рисунках 3.3.1 – 3.3.6 обозначен как TSIP) и метода расщепления (МСП) (2.6.46) – (2.6.51) (на рисунках 3.3.1 – 3.3.6 обозначен как SSM) для эволюционной задачи. Стоит отметить, что в рассматриваемом случае значение инварианта так же не зависит от выбора метода решения уравнения Пуассона. Из анализа графиков видно, что оба метода сохраняют инвариант с высокой точностью при разных шагах по времени, следовательно, данные методы консервативны. Отметим, что при использовании ТЭИП инвариант на шесть порядков меньше, чем при использовании метода расщепления. Это намного меньше порядка аппроксимации схемы, а потому небольшим ростом инварианта в данном случае можно пренебречь. Резкий скачек значения инварианта для метода расщепления соответствует моменту начала взрывного роста поглощения из-за ОБ и началу формирования контрастной пространственно-временной структуры.

Присутствие ненулевой подвижности электронов ($\mu_x = \mu_y = \mu_z = \mu = 1$) в случае использования МСП (2.8.9) – (2.8.10) для решения уравнения Пуассона не влияет на точность сохранения инварианта – оба метода (ТЭИП и МСП) удовлетворяют требованию консервативности (рис. 3.3.2).

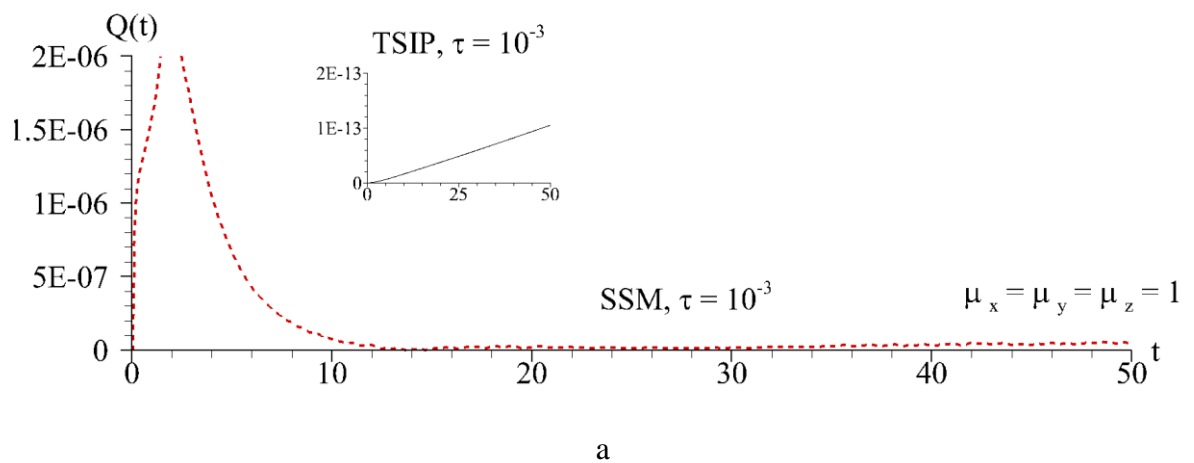


a



b

Рис. 3.3.1. Эволюция инварианта (2.3.11) при использовании метода стабилизирующей поправки (SSM) и ТЭИП (TSIP) с нулевой подвижностью при разных шагах по времени: $\tau = 10^{-3}$ (а) $\tau = 10^{-4}$ (б) при решении уравнения Пуассона с помощью МСП (2.8.9) – (2.8.10).



a

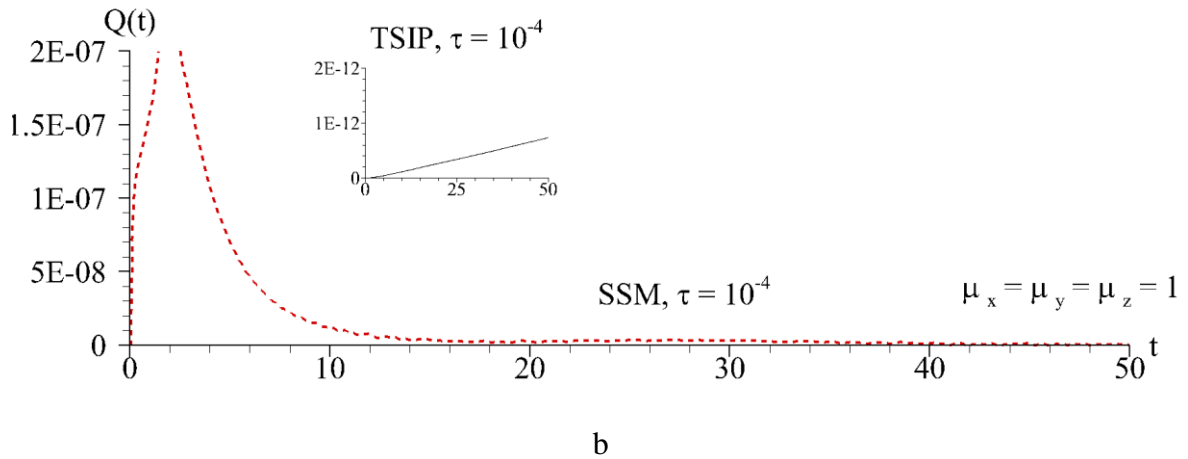
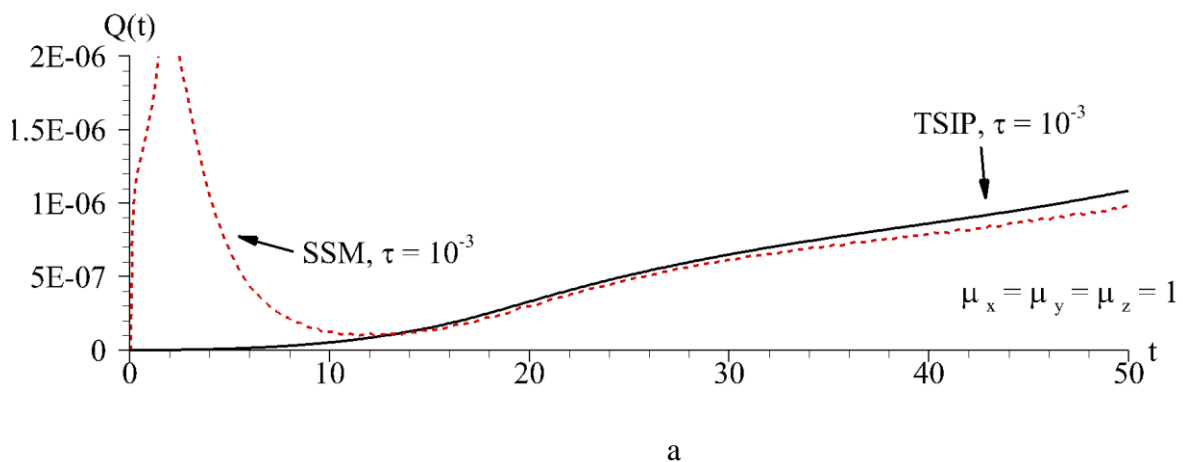


Рис. 3.3.2. Эволюция инварианта (2.3.11) при использовании метода стабилизирующей поправки (SSM) и ТЭИП (TSIP) с ненулевой подвижностью при разных шагах по времени: $\tau = 10^{-3}$ (а) $\tau = 10^{-4}$ (б) при решении уравнения Пуассона с помощью МСП (2.8.9) – (2.8.10).

Теперь рассмотрим результаты расчетов, в которых для решения уравнения Пуассона использовался прямой метод (БДПФ). Как видно из рис. 3.3.3 инвариант начинает расти с зависимостью, близкой к линейной, не зависимо от выбора метода решения эволюционной задачи (2.3.4) – (2.3.8). Как было показано в §3.1 на примере 2D случая, это может привести к существенному искажению численного решения при проведении расчетов на большом временном отрезке. Уменьшение шага по времени (рис. 3.3.3 б) не приводит к каким-либо заметным улучшениям. Таким образом, можно говорить, что при наличии нелинейной связи между уравнениями системы обусловленной присутствием подвижности электронов в конвективном слагаемом уравнения относительно концентрации свободных электронов, использование БДПФ для решения уравнения Пуассона приводит к накоплению вычислительных ошибок и, как следствие, нарушению условий разрешимости задачи Неймана и свойства консервативности.



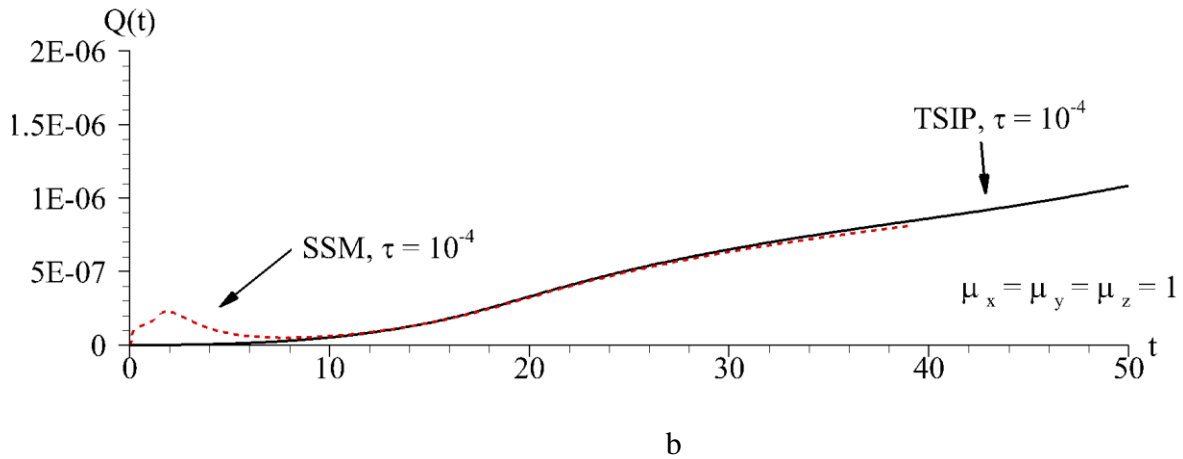


Рис. 3.3.3. Эволюция инварианта (2.3.11) при использовании метода стабилизирующей поправки (SSM) и ТЭИП (TSIP) с ненулевой подвижностью при разных шагах по времени: $\tau = 10^{-3}$ (а) $\tau = 10^{-4}$ (б) при решении уравнения Пуассона с помощью БДПФ.

3.3.2. Асимптотическая устойчивость разностных решений

На рисунках 3.3.1 – 3.3.3 можно заметить, что значение инварианта (2.3.11) так же зависит от шага по времени, что наводит на вопрос об асимптотической устойчивости рассматриваемых методов для решения задачи (2.3.4) – (2.3.8).

На рис. 3.3.4 и рис. 3.3.5 представлены нормы разности для концентрации свободных электронов, рассчитанных на сгущающихся сетках при помощи ТЭИП и МСП, соответственно. Для решения уравнения Пуассона используется метод стабилизирующей поправки (2.8.9) – (2.8.10). Из рис. 3.3.4 следует, что при расчете ТЭИП увеличение шага по времени на порядок не влияет существенно на полученное решение: величина нормы $\|n(\tau_1) - n(\tau_2)\|_C$ имеет порядок 10^{-5} , а $\|n(\tau_1) - n(\tau_2)\|_{L_2}$ - порядок 10^{-7} . Напротив, при использовании МСП (рис.3.3.5) увеличение шага по времени приводит к изменению распределения функции n : величина нормы $\|n(\tau_1) - n(\tau_2)\|_C$ возрастает до порядка 10^{-2} , а $\|n(\tau_1) - n(\tau_2)\|_{L_2}$ - до порядка 10^{-4} . Из этих результатов можно сделать вывод о том, что ТЭИП менее чувствителен к размеру шагов разностной сетки, чем МСП. Отметим также, что при использовании МСП норма разности между решениями, полученными при шагах $\tau = 10^{-3}$ и $\tau = 10^{-4}$ со временем возрастает, что говорит об отсутствии асимптотической устойчивости у этого метода. При расчетах методом ТЭИП разность между решениями сохраняется даже на больших временных отрезках.

Чтобы оценить точность численных решений, сравнивались решения полученные с помощью ТЭИП и МСП при разных шагах по времени (рис. 3.3.6). Как можно заметить, решения, вычисленные при одинаковых достаточно крупных шагах ($\tau = 10^{-3}$), существенно отличаются друг от друга (сплошная черная линия). Однако, при уменьшении шага для МСП до $\tau = 10^{-4}$, полученное решение приближается к решению, полученному с помощью ТЭИП с шагом $\tau = 10^{-3}$ (пунктирная красная линия): величина нормы $\|n(\tau_1) - n(\tau_2)\|_C$ уменьшается на порядок – с 10^{-2} до 10^{-3} , а $\|n(\tau_1) - n(\tau_2)\|_{L_2}$ – с 10^{-4} до 10^{-5} . Таким образом ТЭИП позволяет проводить вычисления на больших отрезках времени без потери точности с более крупными шагами по времени. Как говорилось выше, данное свойство является очень важным преимуществом при моделировании многомерных задач.

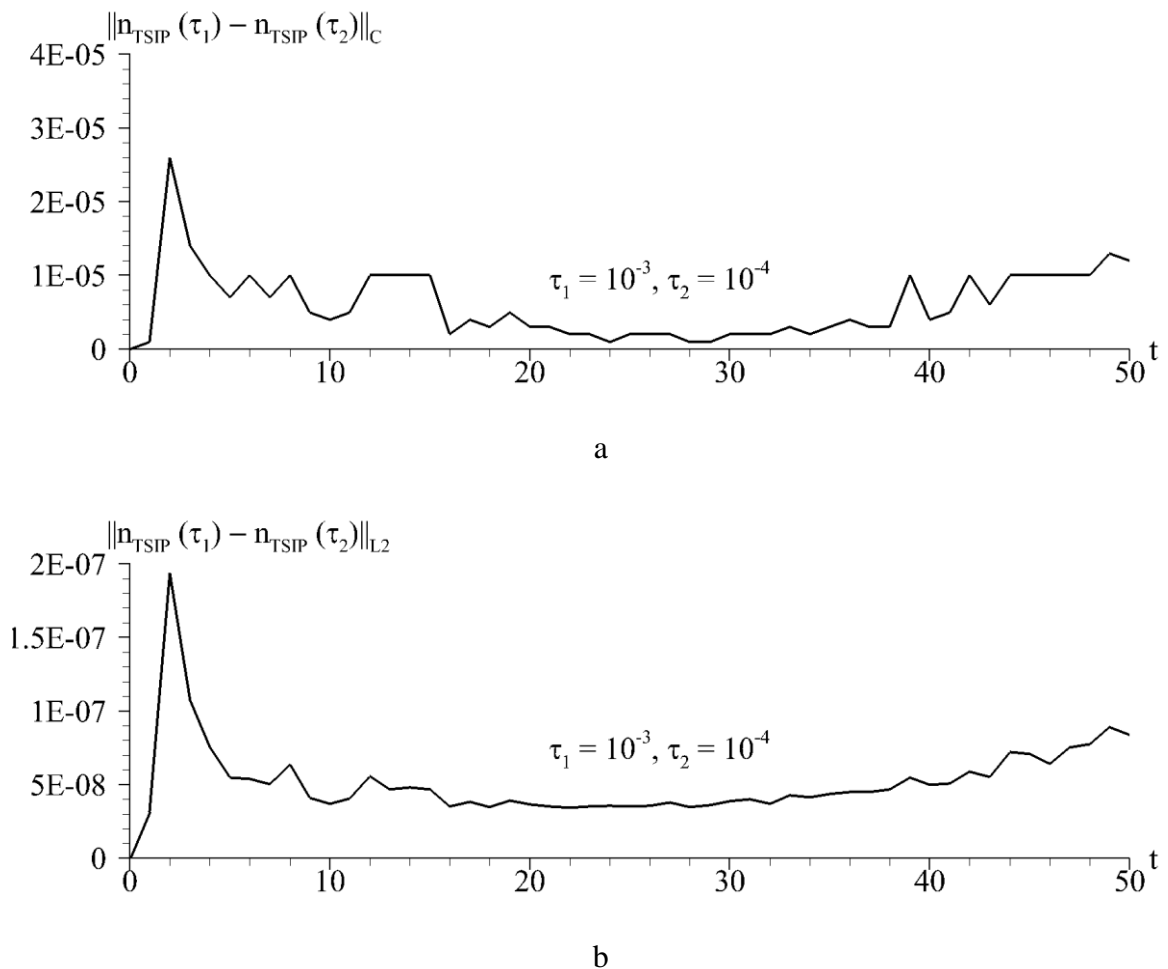
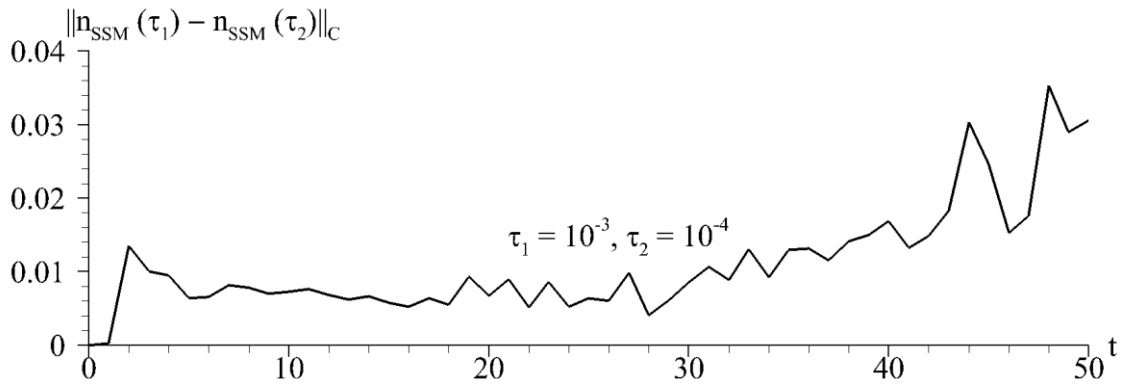
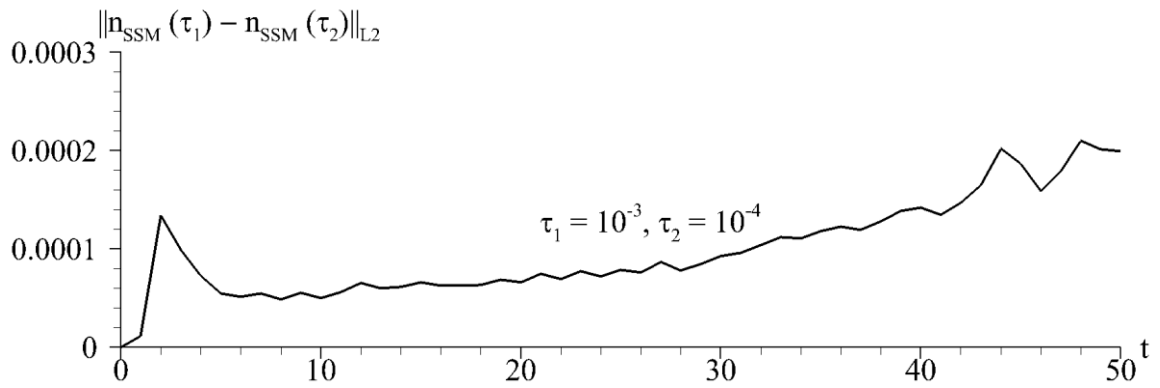


Рис. 3.3.4. Эволюция норм разности концентраций свободных электронов при расчете с помощью ТЭИП с шагами по времени 10^{-3} и 10^{-4} .

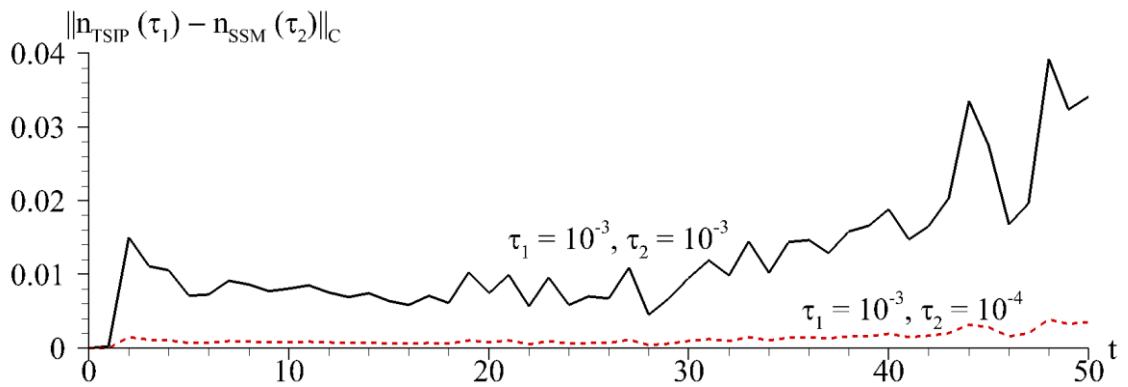


a



b

Рис. 3.3.5. Эволюция норм разности концентраций свободных электронов при расчете с помощью метода расщепления с шагом по времени 10^{-3} и 10^{-4} .



a

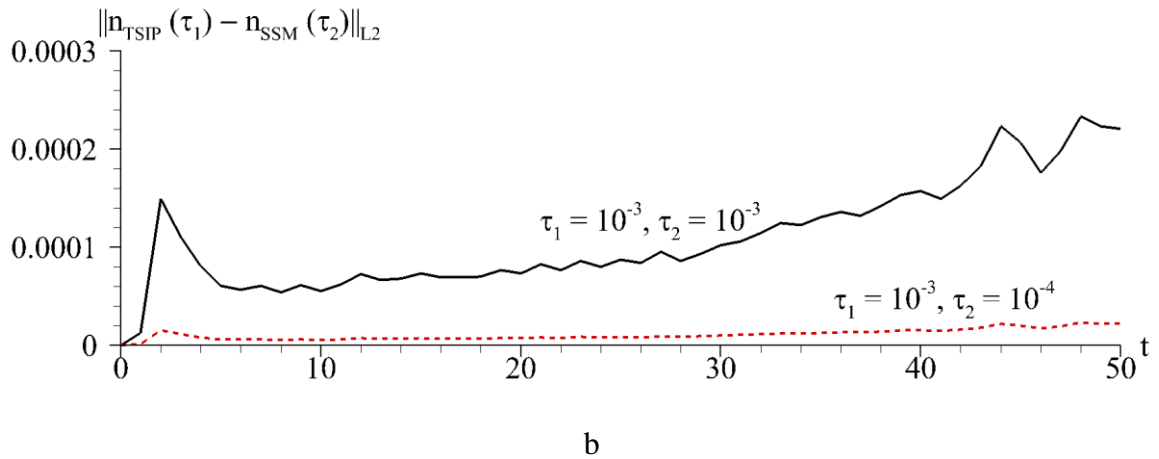


Рис. 3.3.6. Эволюция норм разности концентраций свободных электронов при расчете с помощью ТЭИП с шагом по времени 10^{-3} и метода расщепления с шагом 10^{-3} (сплошная линия) и 10^{-4} (пунктирная линия).

3.3.3. Случай неоднородных граничных условий

Рассмотрим эволюционную задачу генерации полупроводниковой плазмы для разных коэффициентов поглощения в случае присутствия внешнего электрического поля вдоль оси x . В силу продемонстрированных выше преимуществ ТЭИП (2.6.2) – (2.6.15), далее при проведении компьютерного моделирования будет использован данный метод с шагом $\tau = 10^{-3}$. Значение компонент внешнего электрического поля: $E_x = 10$, $E_y = 0$, $E_z = 0$. Для нахождения начального распределения использовался итерационный метод (2.7.17).

Важно отметить, что в случае полевой ОБ (1.1.8) функция G нелинейно зависит от потенциала. Таким образом отличия в значениях потенциала электрического поля, полученных с помощью разных методов решения уравнения Пуассона, влияет на полученные результаты даже в случае отсутствия подвижности электронов: $\mu_x = \mu_y = \mu_z = 0$.

На рис. 3.3.7 видно, что при применении МСП (2.8.9) – (2.8.10) (на рисунках 3.3.7 – 3.3.13 указан как SSM) для решения уравнения Пуассона (рис.3.3.7 b, d) инвариант сохраняется с порядком $10^{-12} - 10^{-13}$ как при нулевой, так и ненулевой подвижности электронов. При этом, если коэффициент поглощения зависит от потенциала электрического поля (рис.3.3.7 d), то при использовании МСП распределения инварианта при разных значениях μ полностью совпадают. При использовании БДПФ (рис.3.3.7 a, c) при нулевой подвижности электронов («выключенной»

обратной связью в системе уравнений) распределение инварианта по времени совпадает с полученным при использовании МСП (рис.3.3.7 b, d). Однако при $\mu = 1$ инвариант возрастает до значений порядка 10^{-6} на расчетном интервале до 100 безразмерных временных единиц и этот рост продолжается (рис.3.3.7 a, c).

Это подтверждает выводы, сделанные в п.3.3.1, о том, что именно наличие нелинейной обратной связи, обусловленной присутствием подвижности электронов, приводит к нарушению условия разрешимости задачи Неймана вследствие накопления вычислительных ошибок при использовании прямых методов.

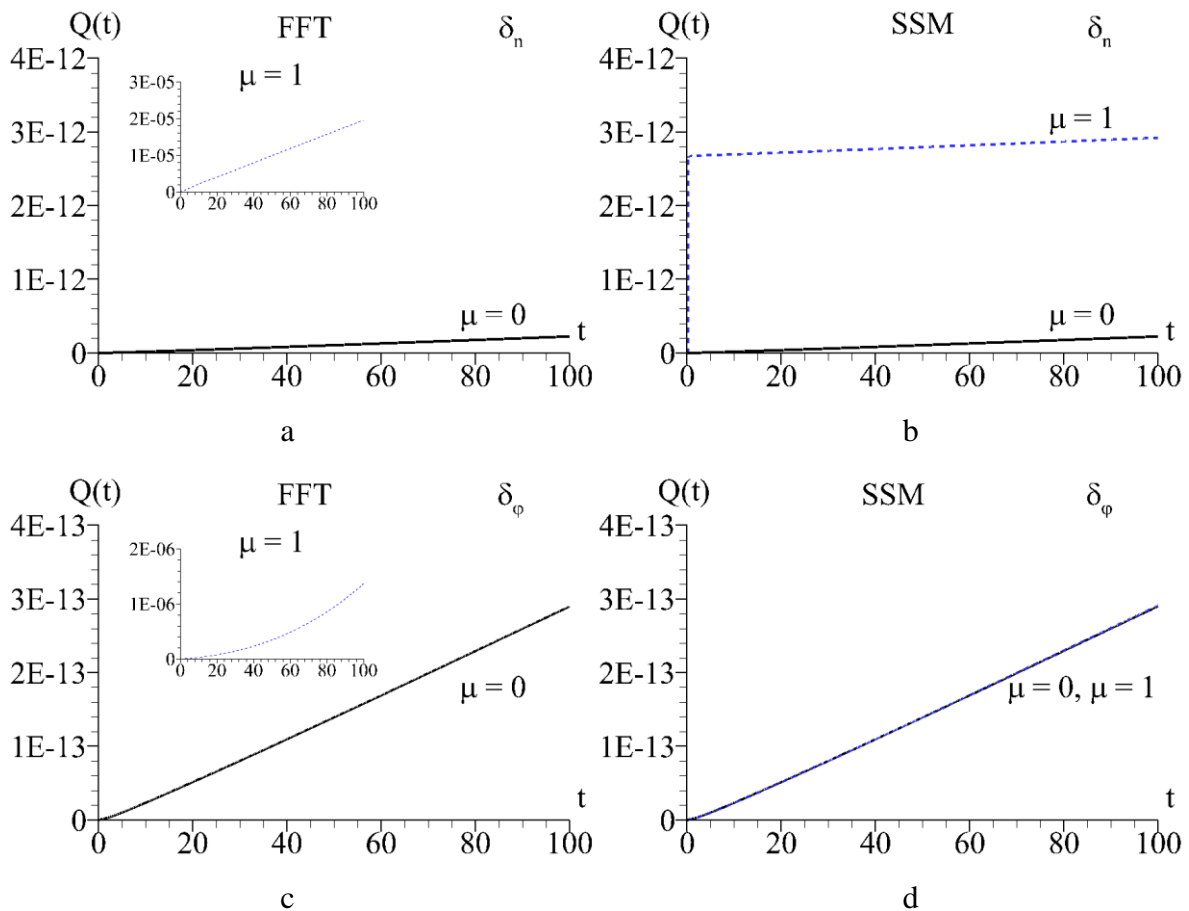
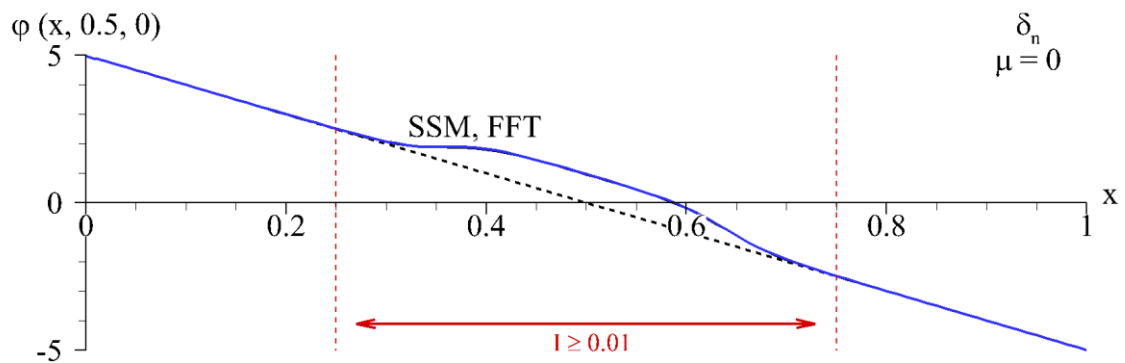


Рис. 3.3.7. Эволюция инварианта (2.3.11) для концентрационной модели ОБ (a, b) и полевой модели ОБ (c, d); уравнение Пуассона решалось с помощью БДФФ (a, c) и МСП (2.8.9) – (2.8.10) (b, d) с нулевой (сплошная черная линия) и ненулевой (пунктирная синяя линия) подвижностью.

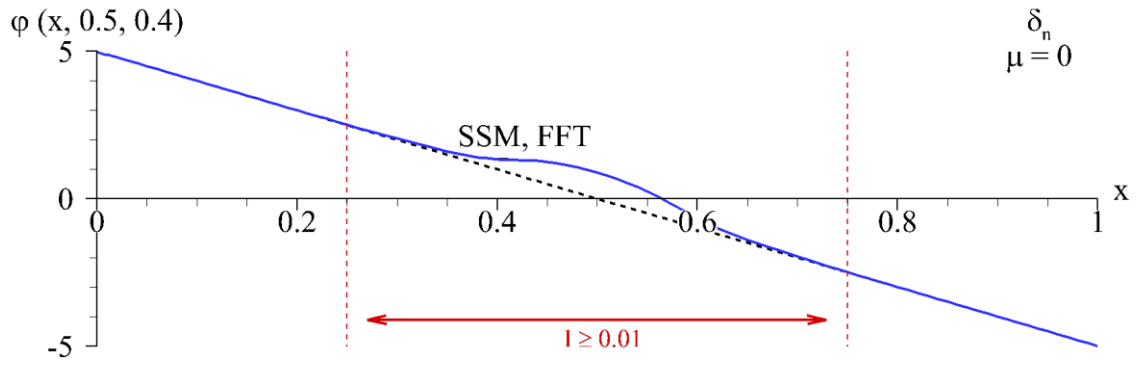
На рис. 3.3.8 и рис. 3.3.9 представлены распределения потенциала электрического поля вдоль оси x в двух сечениях по продольной координате: $z = 0$, $z = 0.4$. Из рисунков следует, что решения, полученные при нулевой подвижности электронов (рис. 3.3.8), совпадают, не зависимо от метода решения уравнения Пуассона и вида коэффициента подвижности. Однако, при ненулевой подвижности электронов (рис. 3.3.9) наблюдается существенное различие в

распределении φ в зависимости от метода решения уравнения Пуассона. При использовании БДПФ для решения задачи концентрационной ОБ (рис. 3.3.9 а, в сплошная синяя линия) потенциал электрического поля значительно отклоняется от своего начального распределения (пунктир) на правой границе рассматриваемой области. Напомним, что распределение потенциала электрического поля находится с точностью до константы (§1.3), однако в данном случае сдвиг решения на константу не приведет к совпадению полученных распределений во всей области. Так же следует отметить тот факт, что отклонения происходят и за пределами освещенной (интенсивность падающего импульса превосходит 10^{-2} безразмерных единиц) области полупроводника (красные вертикальные линии), что противоречит физической природе процесса - существенного отклонения от начального распределения (пунктирная черная линия) там не должно возникать. В то же время, при использовании МСП для решения уравнения Пуассона (черная сплошная линия) отклонение численного решения от начального распределения вне освещенной зоны незначительно.

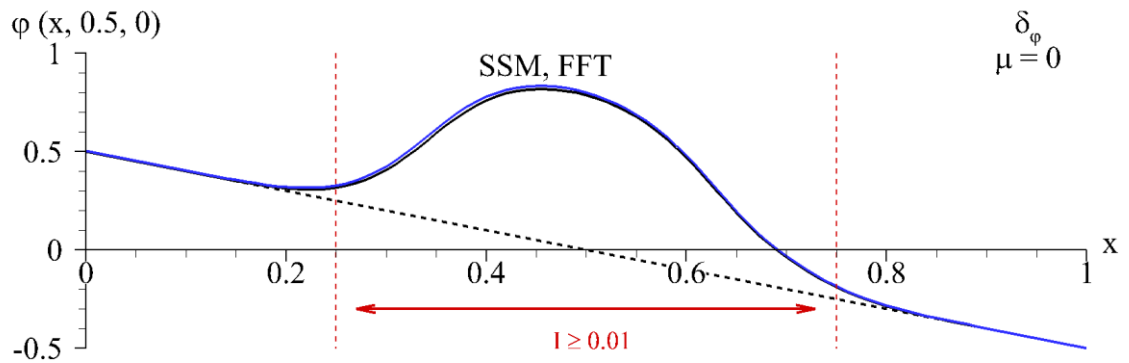
Для полевой модели ОБ (рис. 3.3.9 с, d) наблюдается аналогичная ситуация, но различия в полученных решениях не столь существенны. При этом значение инварианта для полевой ОБ (рис 3.3.7 с, d, пунктирная линия) на порядок меньше, чем в случае концентрационной ОБ (3.3.7 а, в, пунктирная линия). Таким образом, наблюдается прямая зависимость между полученными распределениями, значениями инвариантов и моделью ОБ.



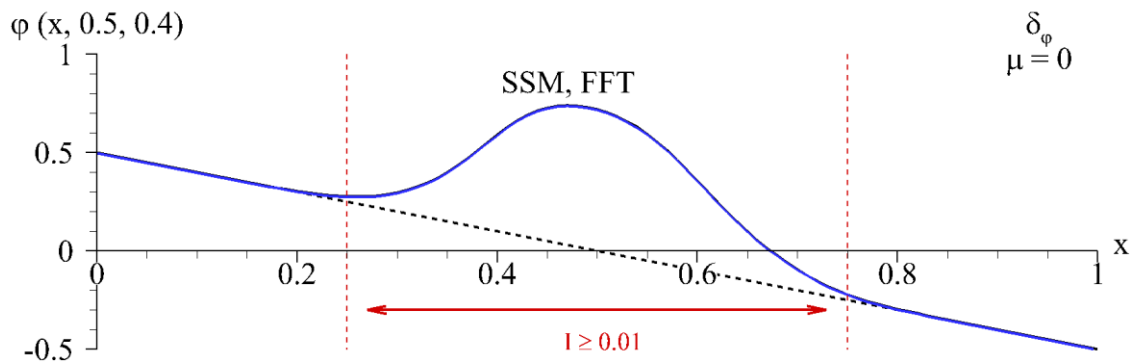
а



b

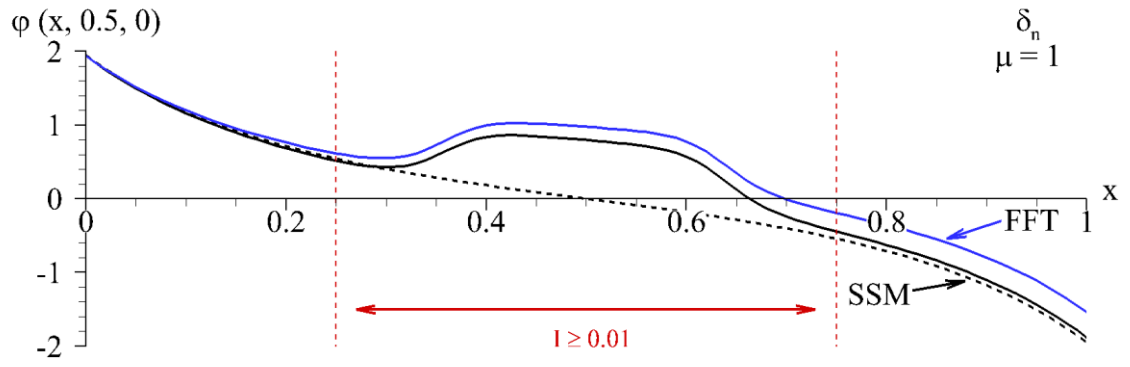


c

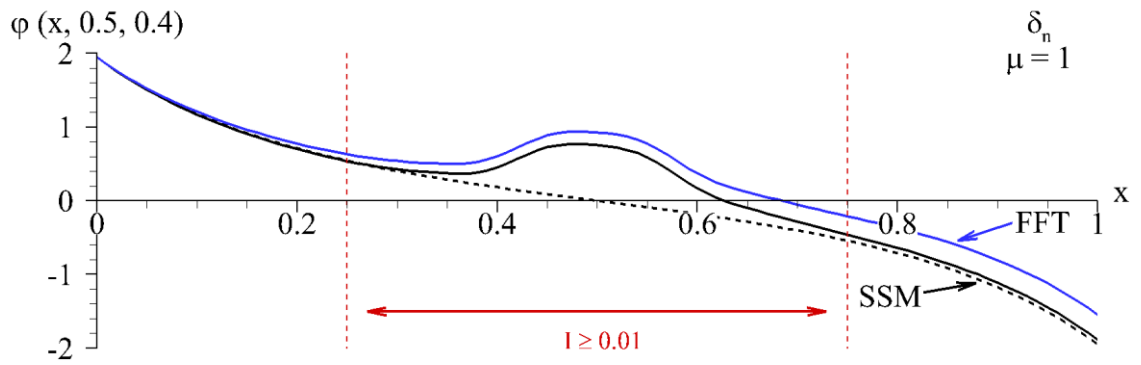


d

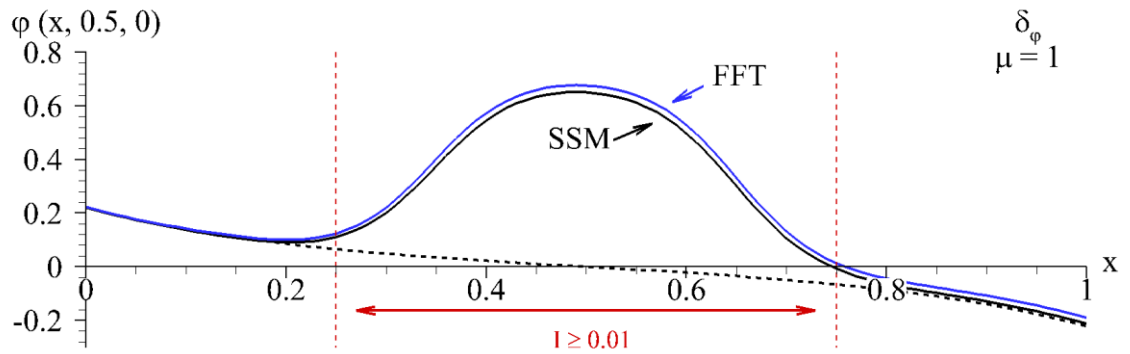
Рис. 3.3.8. Случай нулевой подвижности электронов: распределение потенциала электрического поля вдоль оси x в разных сечениях по продольной координате $z=0$ (а, с), $z=0.4$ (b, d) момент времени $t=100$ для концентрационной модели ОБ (а, b) и полевой модели ОБ (с, d) при использовании МСП (черная сплошная линия) или БДПФ (синяя сплошная линия) для решения уравнения Пуассона. Красные линии обозначают область, занятую оптическим пучком. Пунктирной черной линией изображено распределение потенциала электрического поля в начальный момент времени.



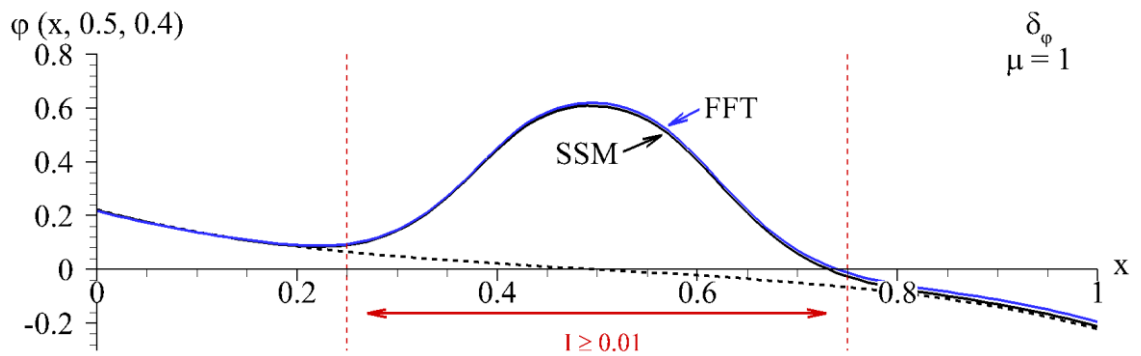
a



b



c

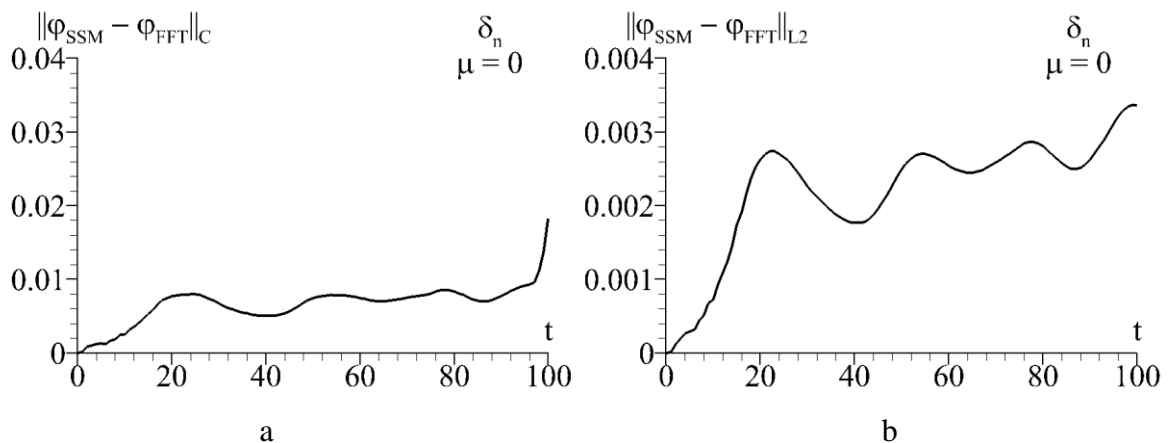


d

Рис. 3.3.9. Случай ненулевой подвижности электронов: распределение потенциала электрического поля вдоль оси x в разных сечениях по продольной координате $z=0$ (а, с), $z=0.4$ (b, d) момент времени $t=100$ для концентрационной модели ОБ (а, b) и полевой модели ОБ (с, d) при использовании МСП (черная сплошная линия) или БДПФ (синяя сплошная линия) для решения уравнения Пуассона. Красные линии обозначают область, занятую оптическим пучком. Пунктирной черной линией изображено распределение потенциала электрического поля в начальный момент времени.

Для количественной оценки ошибок при использовании разностных методов, наблюдаемых на рис. 3.3.8 и рис. 3.4.6, построим разность решений (значения потенциала электрического поля и концентрации свободных электронов) в нормах C и L_2 . Из рис. 3.3.10 следует, что при нулевой подвижности электронов нормы разности между решениями, полученными с использованием МСП и БДПФ имеют порядок $10^{-2} - 10^{-3}$. Заметим, что норма разности для функции n в случае концентрационной ОБ отсутствует на графиках, так как распределения свободных электронов в данном случае не зависят от выбора метода решения уравнения Пуассона и полностью совпадают. Однако, если коэффициент поглощения зависит от потенциала электрического поля (рис. 3.3.10 е, f), такая зависимость присутствует. Постоянный рост норм разности (рис. 3.3.10 с, d, е, f) указывает на расхождение численных решений в связи с накоплением вычислительных ошибок со временем.

При ненулевой подвижности электронов (рис. 3.3.11) значения норм разности на несколько порядков выше, чем для нулевой (рис. 3.3.10). При этом значительное отклонение в распределении потенциалов наблюдается даже при расчетах на коротких временных отрезках (рис. 3.3.11 а, b, е, f) как для полевой, так и для концентрационной моделей ОБ.



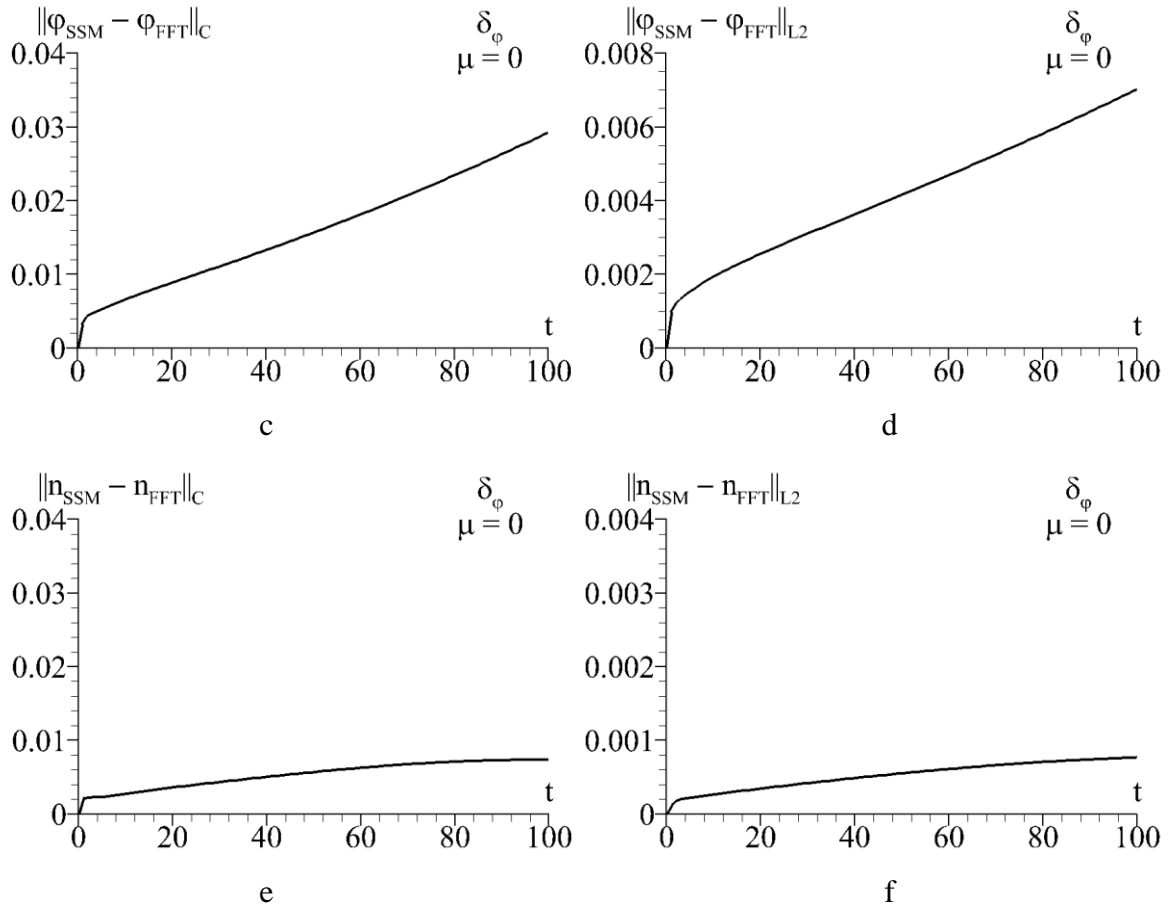
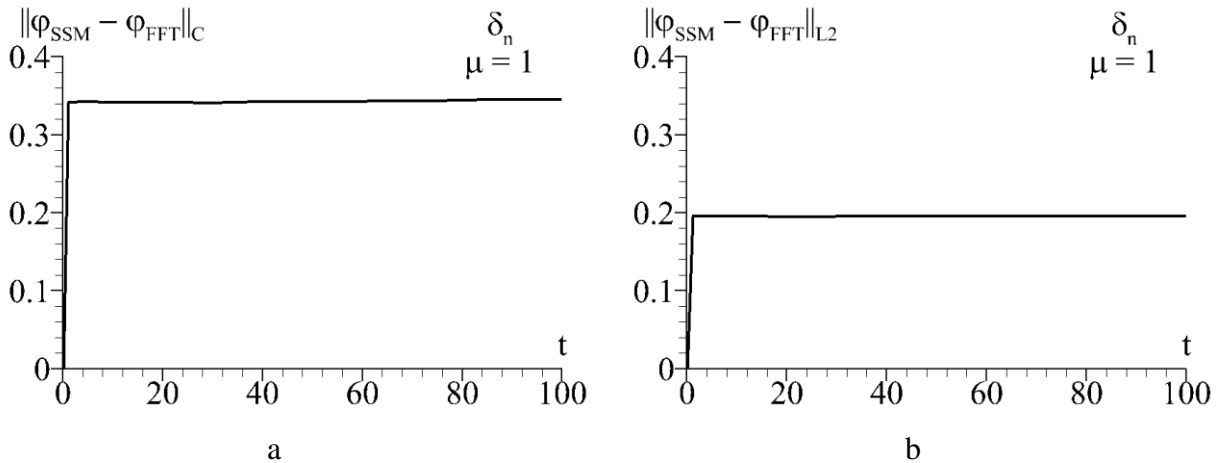


Рис. 3.3.10. Случай нулевой подвижности электронов: эволюция нормы разности потенциала электрического поля (a, b, c, d) и нормы разности концентрации свободных электронов (e, f) при использовании МСП и БДПФ для решения уравнения Пуассона для коэффициента поглощения (1.1.7) (a, b) и (1.1.8) (c, d, e, f).



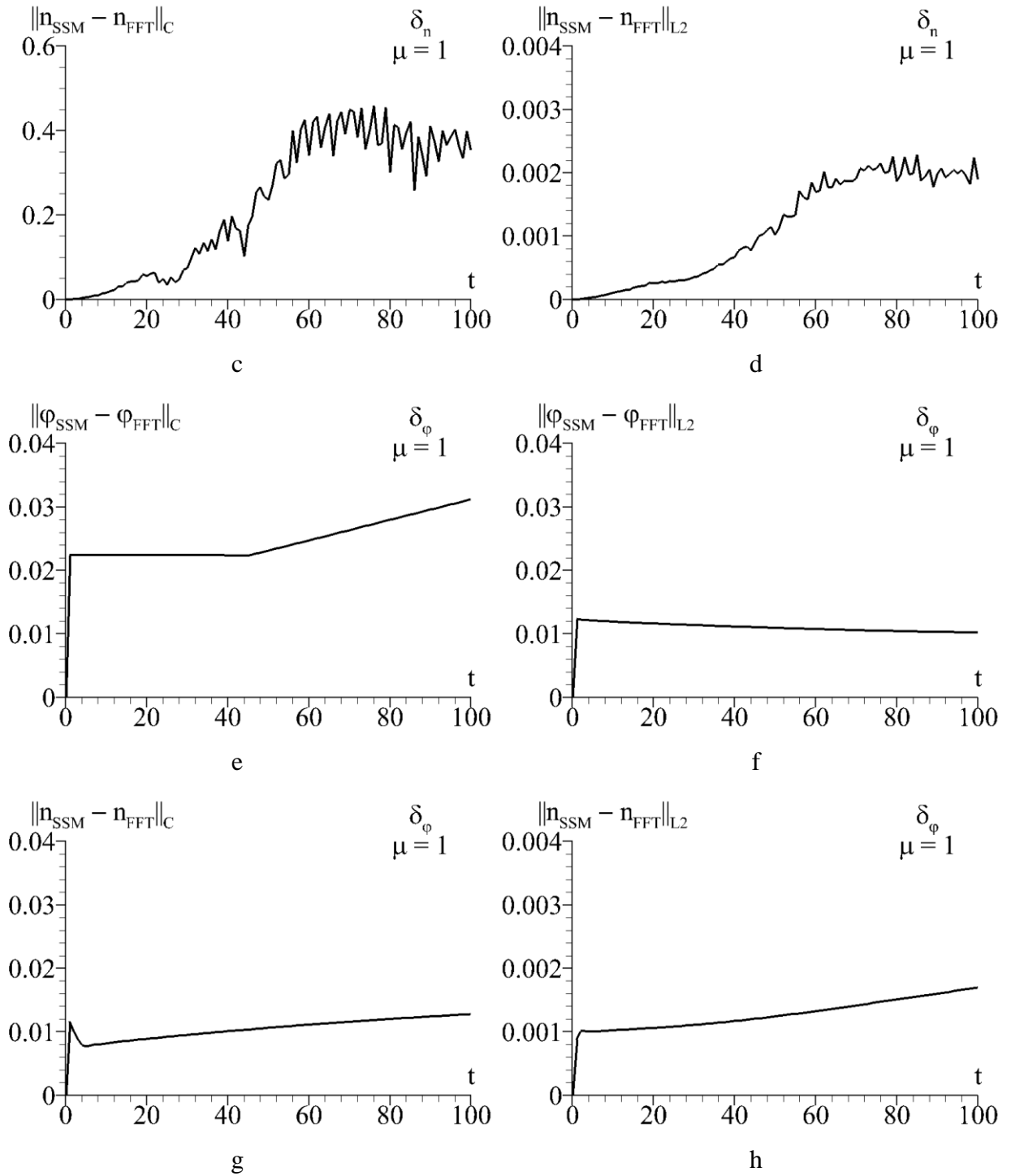


Рис. 3.3.11. Случай ненулевой подвижности электронов: эволюция нормы разности потенциала электрического поля (a, b, e, f) и нормы разности концентрации свободных электронов (c, d, g, h) при использовании МСП и БДФ для решения уравнения Пуассона для коэффициента поглощения (1.1.7) (a, b, c, d) и (1.1.8) (e, f, g, h).

Другой интересной особенностью является отличие на два порядка нормы C и нормы L_2 разности n для концентрационной модели ОБ (рис. 3.3.11 c, d). С учетом определения норм (3.3.2) это говорит о том, что существенные различия в распределениях функций имеют место лишь в

небольшом числе пространственных точек, а в остальной области распределения приблизительно совпадают. Пример такой точки можно увидеть на рис. 3.3.12. На графике видно, что максимальное отличие распределений достигается в окрестностях одного из пиков концентрации свободных электронов, которые формируются на границе области высокого поглощения, в то время как в остальной области решения близки друг к другу.

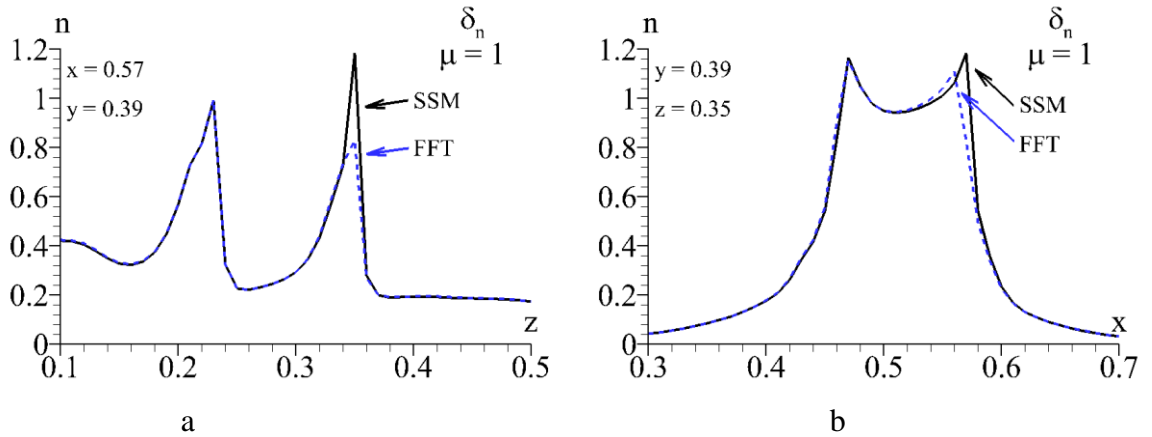
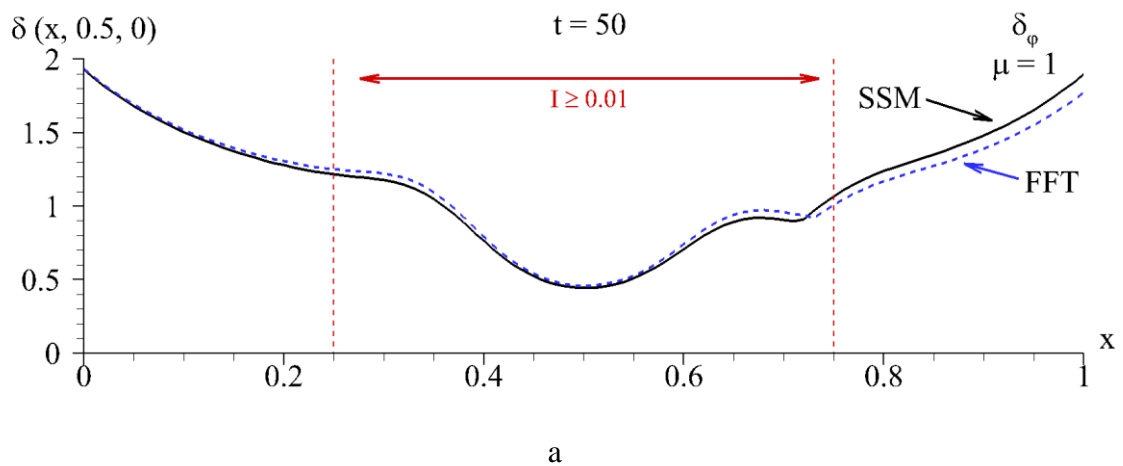


Рис. 3.3.12. Случай ненулевой подвижности электронов: распределение концентрации свободных электронов вдоль осей z (а) и x (б) в момент времени $t=100$ для коэффициента поглощения (1.1.7) при использовании МСП (черная сплошная линия) или БДФ (синяя пунктирная линия) для решения уравнения Пуассона.

На рис. 3.3.13 представлены распределения коэффициента поглощения (1.1.8). Они так же демонстрируют отличия в результатах компьютерного моделирования, полученных разными методами.



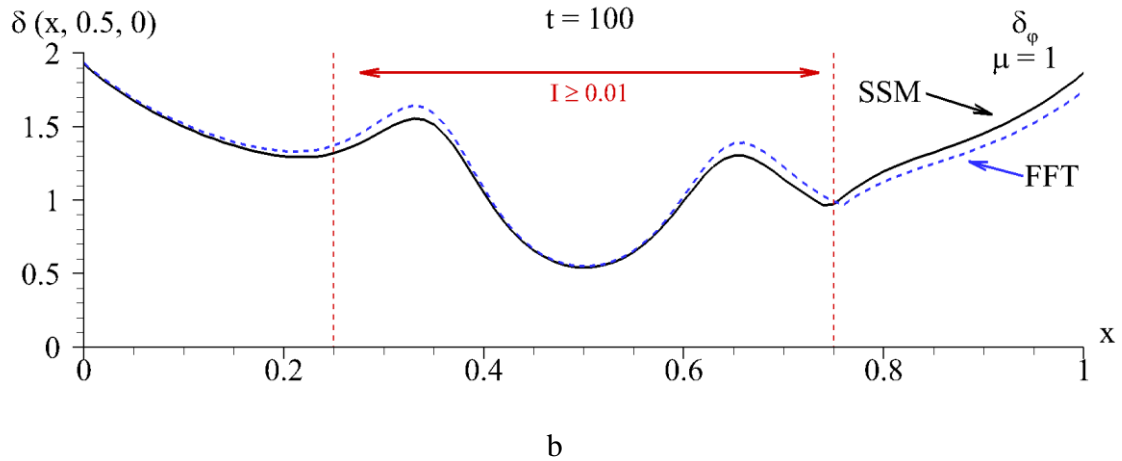


Рис. 3.3.13. Распределение коэффициента поглощения вдоль оси x в сечении $(x, 0.5, 0)$ в моменты времени $t = 50$ (a), $t = 100$ (b) для полевой модели ОБ при использовании МСП метода (черная сплошная линия) или БДПФ (синяя пунктирная линия) для решения уравнения Пуассона при ненулевой подвижности.

Таким образом, анализ результатов компьютерного моделирования продемонстрировал, что для решения 3D задачи Неймана для уравнения Пуассона, включенного в систему нелинейных нестационарных уравнений в частных производных с нелинейной обратной связью обусловленной присутствием подвижности электронов, применение итерационных методов (МСП) эффективнее, прямых методов. Использование последних приводит к нарушению условия разрешимости задачи Неймана и искажению численного решения.

§3.4. Краткие выводы

В главе 3 показано, что двухэтапный итерационный процесс обладает рядом преимуществ (консервативностью и асимптотической устойчивостью) перед методом расщепления при решении задачи взаимодействия лазерного импульса с полупроводником и позволяет проводить расчеты на больших временных интервалах с сохранением симметричности решения. При этом шаги разностной сетки могут быть достаточно крупными (относительно случая использования метода расщепления), что делает использование двухэтапного итерационного процесса выгодным с точки зрения вычислительных затрат.

При решении уравнения Пуассона с помощью метода переменных направлений проведено исследование различных критериев его сходимости. Показано, что при использовании критерия,

основанного на оценке невязки, для сходимости требуется меньшее число итераций без потери точности разностного решения, чем при использовании критерия, основанного на оценке относительной погрешности. Так как уравнение Пуассона необходимо решать многократно на каждом временном слое, эти данные носят важный прикладной характер.

С помощью численных экспериментов продемонстрирована необходимость высокой точности вычисления начальных распределений характеристик полупроводника для случая нахождения полупроводника во внешнем электрическом поле и показано влияние нормировки решения задачи Неймана для уравнения Пуассона при моделировании полевой ОБ с различными наборами параметров.

Продемонстрировано нарушение условия разрешимости при применении прямых методов для решения задачи Неймана для уравнения Пуассона, входящего в систему нестационарных уравнений и нелинейно связанного с уравнением, содержащем конвективное слагаемое. Это связано с нарушением условия разрешимости задачи Неймана при использовании прямых методов. На примере БДФ и МСП проведено сравнение эффективности прямых и итерационных методов. Показано, что решения, полученные с помощью этих подходов, совпадают при отсутствии нелинейной обратной связи в системе и существенно различаются при ее реализации. Неэффективность использования прямых методов следует учитывать при решении других задач такого типа.

Экспериментально подтверждена асимптотическая устойчивость трехэтапного итерационного процесса и продемонстрировано ее отсутствие у метода стабилизирующей поправки, что приводит к необходимости сгущать разностные сетки и, следовательно, существенно увеличивает длительность расчетов.

Глава 4. Компьютерное моделирование нелинейного взаимодействия оптического излучения с полупроводником

§4.1. Компьютерное моделирование оптической бистабильности. Построение гистерезисных зависимостей характеристик полупроводника от входной интенсивности оптического импульса

При работе над параграфом использовались материалы из публикаций автора [А4, А5, А7, А14].

4.1.1. Построение гистерезисной петли для полевой модели в 2D случае

Как известно, алгоритм построения гистерезисной петли следующий: сначала рассчитывается стационарное распределение характеристик полупроводника при достаточно низкой интенсивности падающего пучка q_{in} , при которой система находится в нижнем состоянии (значение концентрации близко или равно начальному значению). Затем, используя полученные распределения характеристик полупроводника в качестве начальных условий, интенсивность падающего пучка увеличивается на некоторую величину Δq ($q_{in} = q_{prev} + \Delta q$) и производится новый расчет, в результате которого получается новое стационарное распределение характеристик полупроводника. Данный процесс продолжается до тех пор, пока при некотором значении интенсивности система не переходит в верхнее состояние (концентрация свободных электронов резко возрастает и достигает значения, близкого к единице). После этого процесс повторяется в обратном направлении – интенсивность падающего пучка уменьшается до тех пор, пока система не вернется в нижнее состояние. Если значения интенсивности, при которых система переключилась в верхнее состояние, и значение, при котором она вернулась обратно в нижнее состояние, отличаются, то имеет место ОБ.

Применительно к 2D задаче (1.1.1) – (1.1.6) с коэффициентом поглощения (1.1.8) (полевая модель), данный алгоритм выглядит следующим образом:

1) Выбирается некое малое начальное значение параметра q_{in} (максимум интенсивности падающего оптического пучка), при котором система оптическое излучение – полупроводник находится в нижнем состоянии, и полагая $G(N, \varphi, I) = q_{in} I \delta(N, \varphi)$.

2) Задача (1.1.1) – (1.1.6) с выбранным значением q_{in} решается на таком временном отрезке, пока система не достигнет стационарного состояния. Предполагается, что для рассматриваемых значений параметров данное состояние достигается, критерием его достижения является неизменность (с определенной точностью) характеристик полупроводника за определенное число шагов по времени.

3) Полученное распределение концентрации свободных электронов, соответствующее максимальной интенсивности q_{in} , используется в качестве начального распределения для следующего расчета. Максимальная интенсивность падающего импульса определяется по формуле: $q_{in}(t') = q_{prev} + \Delta q(1 - e^{-10t'})$, в которую для обеспечения плавного выхода интенсивности на новое значение введена экспонента $e^{-10t'}$. Таким образом на каждом этапе расчета параметр t' принимает значения от нуля до момента времени, при котором система достигает стационарного состояния.

4) Процедура повторяется до тех пор, пока система оптическое излучение – полупроводник не переключится в верхнее состояние. Далее проводятся расчеты при уменьшающейся максимальной интенсивности падающего излучения, определяемой по формуле: $q_{in}(t') = q_{prev} - \Delta q(1 - e^{-10t'})$. Расчеты продолжаются пока q_{in} не вернется к своему исходному значению.

В диссертации рассматривалась задача со следующим набором параметров:

$$\kappa_x = \kappa_y = 10^{-3}, \quad \gamma = 10^3, \quad n_0 = 0.1, \quad \mu_x = \mu_y = 1, \quad a_x = 0.1, \quad \tau = 0.001, \quad h_x = h_y = 0.01, \quad L_x = L_y = 1.$$

Как видно из рис. 4.1.1, гистерезисная зависимость существует не только на передней грани полупроводника (а), но и в других сечениях (b, c, d). Ширина гистерезисной петли и контрастность переключения между верхним и нижним состояниями системы уменьшается с увеличением продольной координаты сечения полупроводника, что обусловлено поглощением оптической энергии в полупроводнике. Вблизи выходного сечения полупроводника (c, d) можно наблюдать мультистабильность. Это явление также подтверждается асимметричной формой изменения импульса, измеренной в разных сечениях полупроводника. На рис. 4.1.2 можно четко проследить данную зависимость.

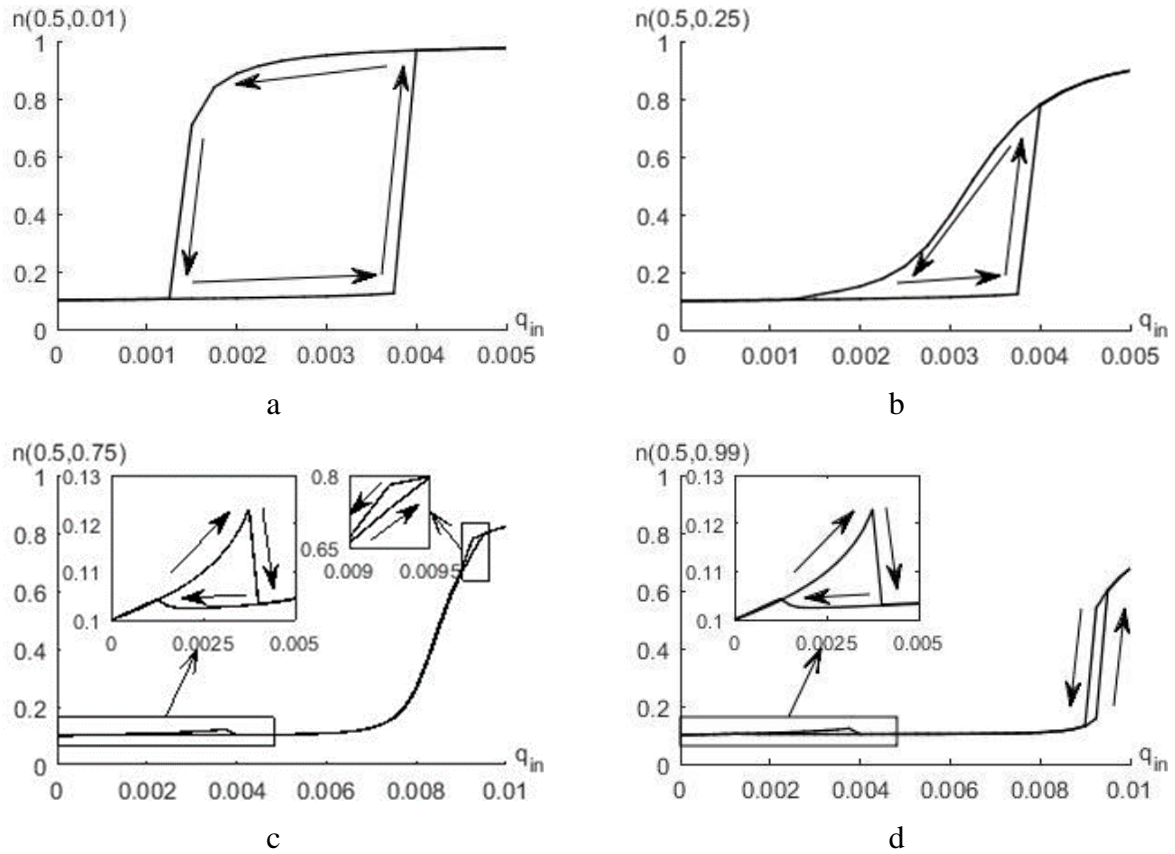


Рис. 4.1.1. Гистерезисные петли концентрации свободных электронов в разных сечениях полупроводника для параметров $\delta_0 = 0.01$, $\alpha = 0$, $\beta = 5$.

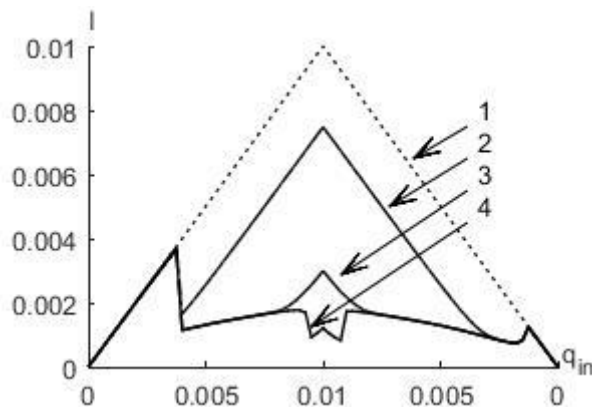


Рис. 4.1.2. Зависимость интенсивности оптического излучения внутри полупроводника от изменения максимума интенсивности падающего пучка (1) в сечениях $y=0.25$ (2), 0.75 (3), 1 (4) для параметров $\delta_0 = 0.01$, $\alpha = 0$, $\beta = 5$.

Параметры, входящие в коэффициент поглощения, играют важную роль при реализации ОБ. При достаточно большом значении β реализуется широкая область бистабильности с высоким контрастом между верхним и нижним состоянием (рис. 4.1.3 а (сплошная линия)). С уменьшением значения этого параметра (рис. 4.1.3 а (пунктирная линия)) резкое изменение

концентрации свободных электронов сохраняется, но происходит изменение интенсивности переключения и ширины зоны ОБ. Дальнейшее уменьшение данного параметра (рис. 4.1.3 б (сплошная линия)) приводит к еще большему уменьшению гистерезисной петли вплоть до значений, когда ее можно зарегистрировать только при расчете с очень маленьким шагом увеличения интенсивности падающего пучка, и увеличению интенсивности, при которой происходит переключение системы в верхнее или нижнее состояние. При достаточно малом β значение концентрации n плавно изменяется и переключения между верхним и нижним состояниями не происходит (рис. 4.1.3 б (пунктирная линия)).

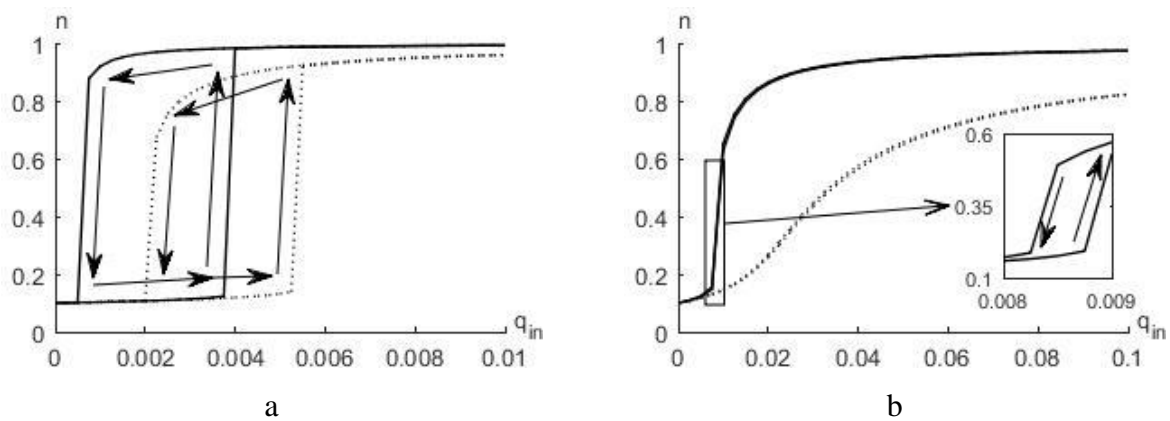


Рис. 4.1.3. Гистерезисные петли концентрации свободных электронов для параметров $\delta_0 = 0$, $\alpha = 0$ $\beta = 5$ (а, сплошная), $\beta = 4$ (а, пунктирная линия), $\beta = 3$ (б, сплошная линия), $\beta = 2$ (б, пунктирная линия).

4.1.2. Влияние длительности оптического импульса на формирование гистерезисной петли

В экспериментах, описанных выше, мы увеличивали интенсивность оптического импульса только после того, как ОБ система достигала своего стационарного состояния и фиксировались значения ее основных характеристик. Теперь рассмотрим случай, когда максимум интенсивности непрерывно зависит от времени по формуле Гаусса:

$$G(N, \varphi, I) = q_{in}(t) I \delta(N, \varphi), \quad q_{in}(t) = q_0 \exp\left(-\left(\frac{t - L_t/2}{L_q}\right)^2\right), \quad (4.1.1)$$

$$I|_{y=0} = e^{-\frac{(x-0.5L_x)^2}{a_x^2}}, \quad 0 \leq x \leq L_x, \quad t \geq 0,$$

где q_0 – максимальная интенсивность падающего импульса, L_q – длительность импульса, L_t – временной интервал, на котором производится расчёт.

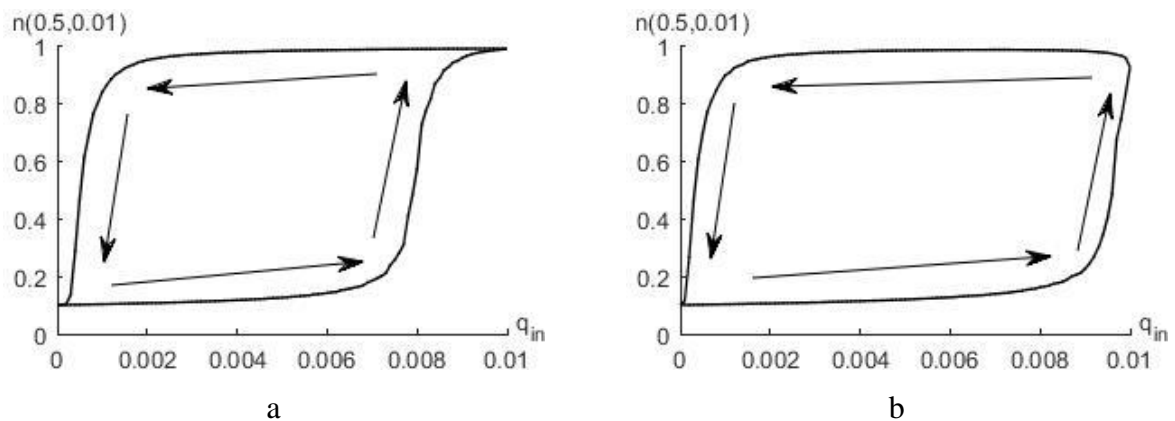
Параметры системы аналогичны параметрам, используемым для построения рис. 4.1.1 – 4.1.3:

$$\kappa_x = \kappa_y = 10^{-3}, \quad \gamma = 10^3, \quad n_0 = 0.1, \quad \mu_x = \mu_y = 1, \quad \delta_0 = 0.01, \quad \alpha = 0, \quad \beta = 5, \quad a_x = 0.1, \\ \tau = 0.001, \quad h_x = h_y = 0.01, \quad L_x = L_y = 1.$$

Однако в данном эксперименте, в отличие от случая рис. 4.1.1, временной интервал, на котором производится расчет, определяется не достижением системой стационарного состояния, а заданным заранее параметром L_t . На рис. 4.1.4 представлена гистерезисная петля концентрации свободных электронов, рассчитанная в разных сечениях полупроводника. Вблизи грани полупроводника, на которую падает импульс (а, б), петля гистерезиса ярко выражена. При этом ее форма (значения интенсивности, при которой происходит переключение между состояниями) зависит от длительности импульса.

Вблизи задней грани полупроводника (рис. 4.1.4 е, ф) наблюдается более сильная зависимость значений концентрации свободных электронов от длительности импульса. В частности, при большей длительности импульса (рис. 4.1.4 е) можно одновременно наблюдать переключения, соответствующие двум типам петель гистерезиса: S-образным и N-образным зависимостям. При меньшей длительности импульса (рис. 4.1.4 ф) вторая петля хоть и присутствует, но выражена куда более слабо.

На рис. 4.1.5 показано изменение максимума интенсивности оптического импульса от времени в рассматриваемых сечениях полупроводника. По резким скачкам интенсивности хорошо видны моменты времени, в которые произошло переключение системы.



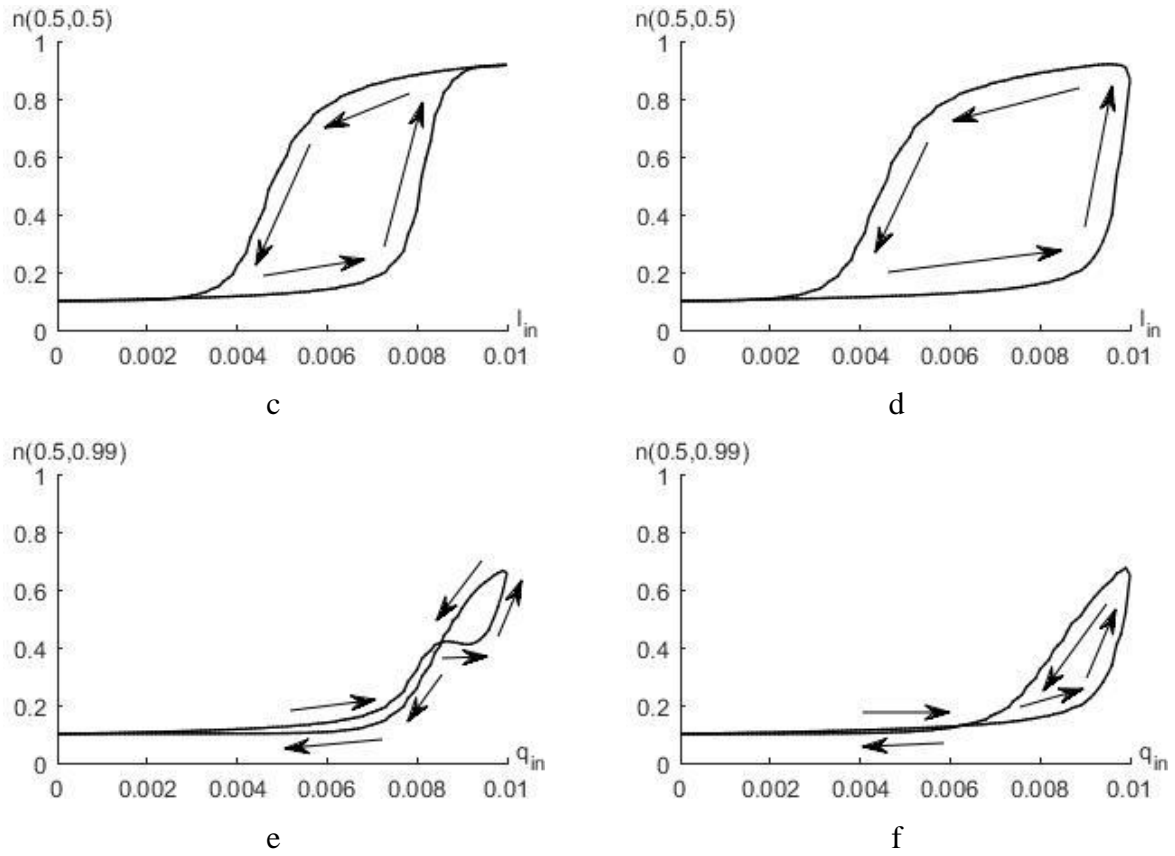


Рис. 4.1.4. Гистерезисные петли для концентрации свободных электронов в разных сечениях полупроводника при $L_q = 100$ (а, с, е), $L_q = 50$ (b, d, f), $L_t = 5L_q$.

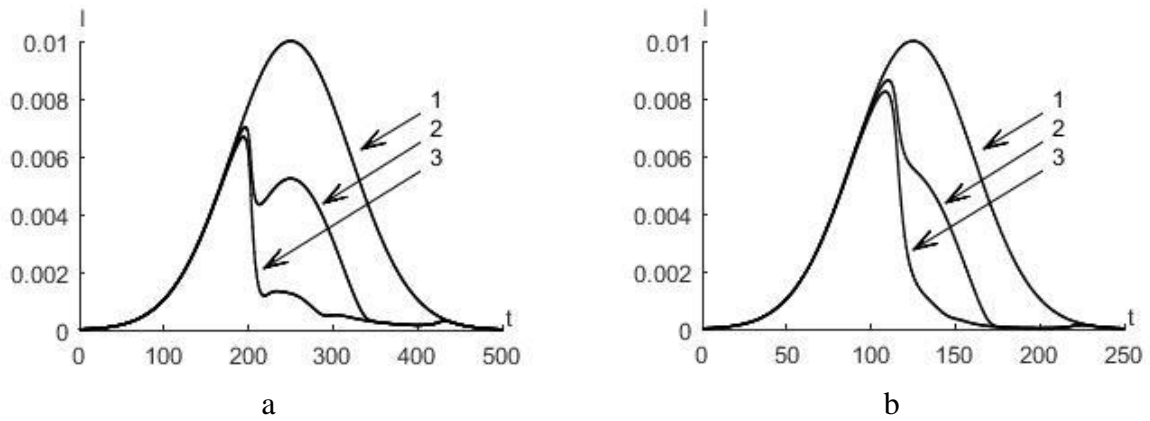


Рис. 4.1.5. Распределение максимума интенсивности оптического импульса по времени при $L_q = 100$ (а), $L_q = 50$ (b), $L_t = 5L_q$ в разных сечениях полупроводника: $y = 0$ (1), $y = 0.5$ (2), $y = 1$ (3).

При воздействии оптического импульса меньшей длительности видна динамическая петля изменения концентрации свободных электронов (рис. 4.1.6 а, б). Однако, в данном случае скорость изменения интенсивности входного излучения значительно превосходит скорость роста концентрации заряженных частиц. Таким образом, значение входящей интенсивности начинает уменьшаться раньше, чем система успевает переключиться в верхнее состояние. Так как в течение некоторого времени значение интенсивности еще достаточно велико для осуществления переключения, то можно наблюдать картину, когда интенсивность уже начала уменьшаться, а концентрация продолжает расти. Наблюдаемые петли практически не зависят от сечения полупроводника: они выглядят аналогично на входе в полупроводник или на его выходе (рис. 4.1.6 с, д). Причина этой особенности заключается в том, что внутри полупроводника не успевают сформироваться домены высокого поглощения и интенсивность на входе близка к интенсивности на выходе (рис. 4.1.7).

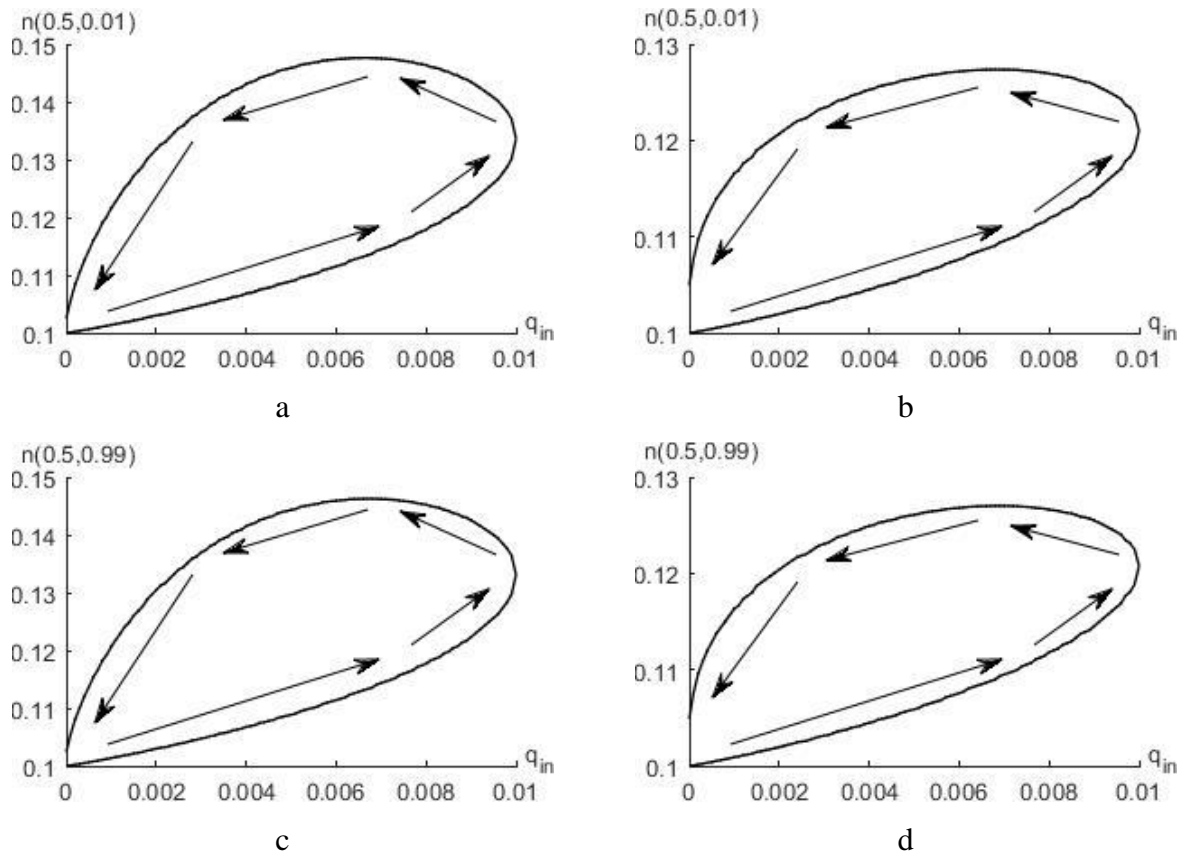


Рис. 4.1.6. Гистерезисные петли для концентрации свободных электронов в разных сечениях полупроводника при $L_q = 10$ (а, с), $L_q = 5$ (б, д), $L_t = 5L_q$.

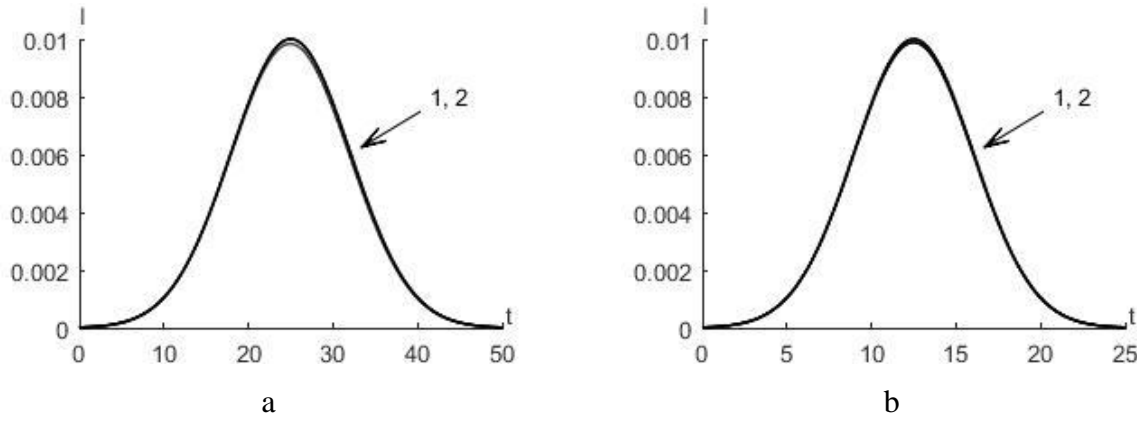


Рис. 4.1.7. Распределение максимума интенсивности оптического импульса по времени при $L_q = 10$ (а), $L_q = 5$ (б), $L_t = 5L_q$. в разных сечениях полупроводника: $y = 0$ (1), $y = 1$ (2).

4.1.3. Построение гистерезисной петли для концентрационной модели оптической бистабильности в 2D случае

Рассмотрим концентрационную модель ОБ. Для построения гистерезисной петли рассмотрим задачу (1.1.1) – (1.1.6) с коэффициентом поглощения (1.1.7) со следующим граничным условием для уравнения интенсивности:

$$I|_{y=0} = e^{-\frac{(x-0.5L_x)^2}{a_x^2}} \left(1 - \left| \frac{t}{0.5L_t} - 1 \right| \right), \quad 0 \leq x \leq L_x, \quad 0 \leq t \leq L_t. \quad (4.1.2)$$

Замечание. Данную задачу можно записать и в виде, аналогичном (4.1.1), тогда постановка примет следующий вид:

$$G(N, \varphi, I) = q_{in}(t) I \delta(N, \varphi), \quad q_{in}(t) = q_0 \left(1 - \left| \frac{t}{0.5L_t} - 1 \right| \right), \quad (4.1.3)$$

$$I|_{y=0} = e^{-\frac{(x-0.5L_x)^2}{a_x^2}}, \quad 0 \leq x \leq L_x, \quad t \geq 0.$$

Условие (4.1.2) соответствует Гауссову пучку по оси x , распределение максимума которого имеет форму треугольника вдоль временной оси (рис. 4.1.8).

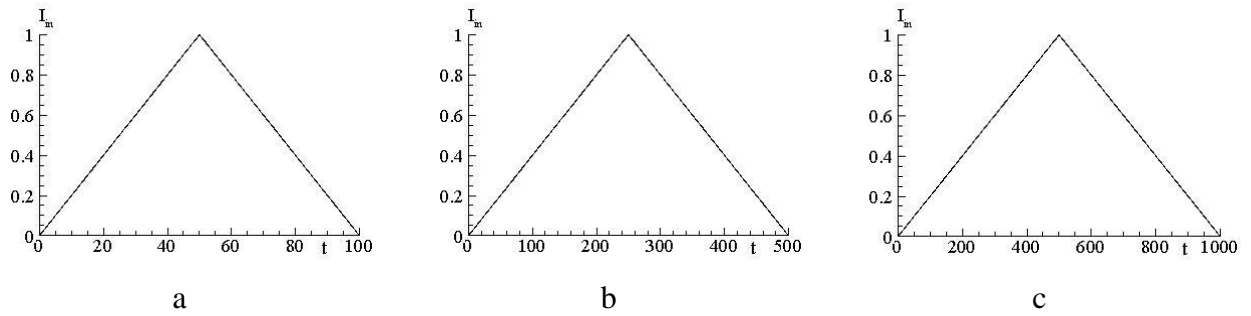


Рис. 4.1.8. Зависимость максимума интенсивности от времени для граничного условия (4.1.2) при длительности импульса $L_t = 100$ (a), 500 (b), 1000 (c).

На рис. 4.1.9 наблюдаются ярко выраженные гистерезисные петли концентрации свободных электронов, полученные на передней грани полупроводника $n = n(0.5, 0, t)$ для следующих параметров:

$$\kappa_x = \kappa_y = 10^{-5}, \mu_x = \mu_y = 1, \gamma = 1000, \tau_R = 1, n_0 = 0.01, a_x = 0.1, \delta_0 = 1, q_0 = 1, \psi = 2.553, \xi = 3.$$

При этом с ростом времени расчета зависимость выходной интенсивности $I_{out} = I(0.5, L_y, t)$ от времени приобретает все более сложную форму (рис. 4.1.10) по сравнению с полевой моделью (рис. 4.1.5). Это связано с тем, что для концентрационной модели ОБ внутри полупроводника характерно формирование сложных динамических областей высокого поглощения. Кроме этого, происходит и смена типа гистерезисной петли: если на рис. 4.1.9 (a) интенсивность, необходимая для переключения в верхнее состояние, выше интенсивности, необходимой для переключения в нижнее (гистерезис S-типа), то на рис. 4.1.9 (b, c) наблюдается обратная ситуация – при уменьшении интенсивности лазерного импульса переключение в нижнее состояние происходит раньше, чем в верхнее при увеличении интенсивности (гистерезис N-типа). Аналогичные петли можно наблюдать если построить зависимость выходной интенсивности $I_{out} = I(0.5, L_y, t)$ от входной $I_{in} = I(0.5, 0, t)$ (рис. 4.1.11).

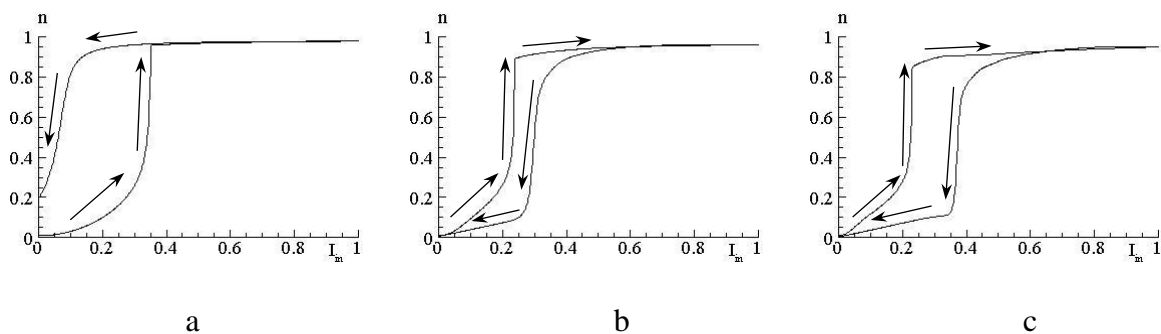


Рис. 4.1.9. Гистерезисные петли для концентрации свободных электронов при длительности импульса $L_t = 100$ (a), 500 (b), 1000 (c).

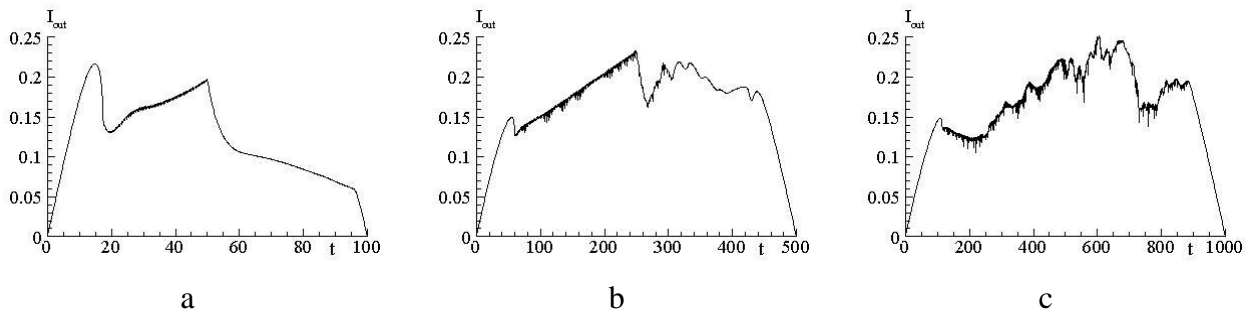


Рис. 4.1.10. Зависимость максимума выходной интенсивности оптического импульса в центре освещенной зоны $I_{out} = I(0.5, L_y, t)$ от времени при длительности импульса $L_t = 100$ (a), 500 (b), 1000 (c).

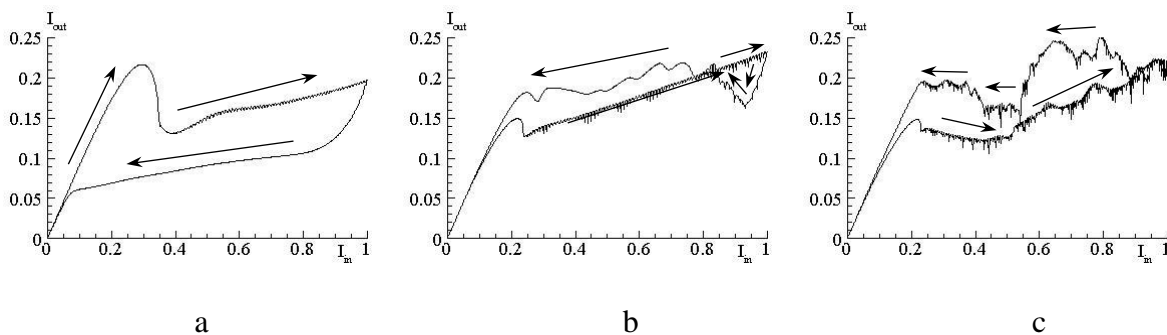


Рис. 4.1.11. Зависимость выходной интенсивности $I_{out} = I(0.5, L_y, t)$ от входной интенсивности $I_{in} = I(0.5, 0, t)$ при длительности импульса $L_t = 100$ (a), 500 (b), 1000 (c). Стрелками обозначено изменение входной интенсивности по времени.

4.1.4. Компьютерное моделирование волн переключения и их регистрация по выходному излучению

В экспериментах информацию о реализации ОБ режима получают через динамику изменения интенсивности оптического импульса на выходе из полупроводника. Если, несмотря на одинаковое значение входной интенсивности в определенные моменты времени, выходная интенсивность в эти моменты отличается (рис. 4.1.1, 4.1.5, 4.1.11), то внутри полупроводника реализуется ОБ. Аналогичная зависимость справедлива, если сравнить эволюцию разности между интенсивностью падающего пучка до его взаимодействия с полупроводником и ее

величиной в неким сечении внутри полупроводника, к примеру, вблизи грани, на которую этот пучок падает ($y = 0.01$). На рис. 4.1.12 представлена разность между данными интенсивностями для случая из рис. 4.1.5 и рис. 4.1.7. Несмотря на малые значения, наблюдается явная несимметричность данной характеристики относительно момента времени, в который интенсивность падающего импульса достигает своего максимума (рис. 4.1.13), что говорит о наличии ОБ в рассматриваемом сечении полупроводника, что было подтверждено на рис. 4.1.4 (a, b) и рис. 4.1.6 (a, b).

Таким образом, основываясь на полученных при компьютерном моделировании результатах, следует, что рассматриваемая модель адекватно описывает физические процессы.

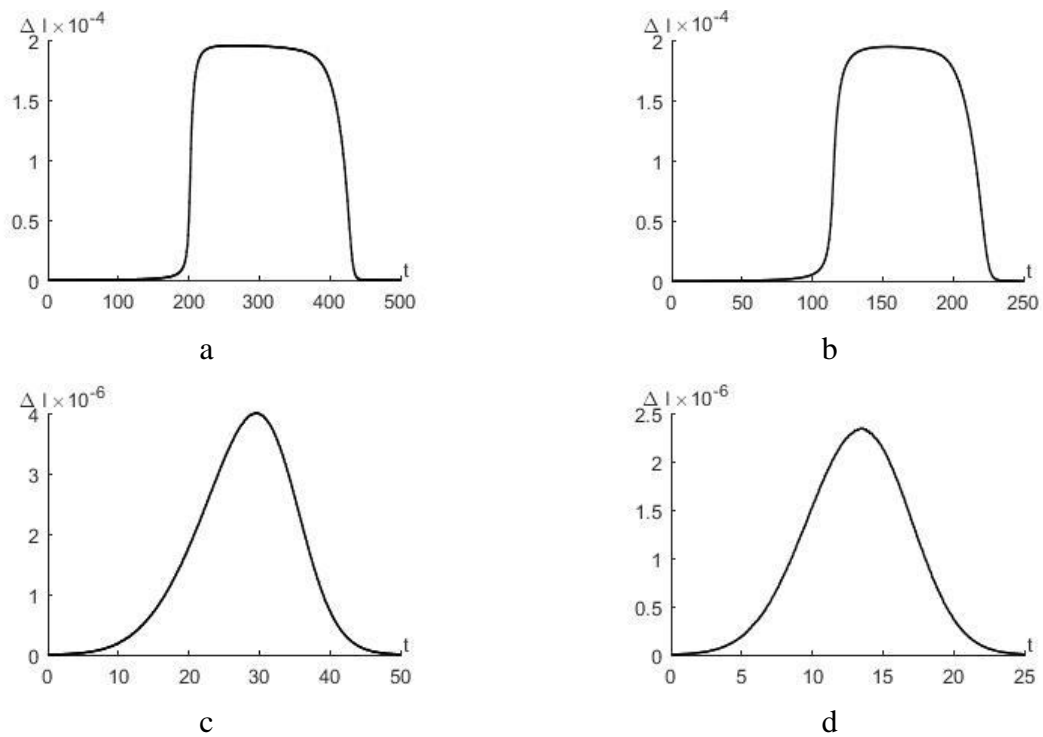
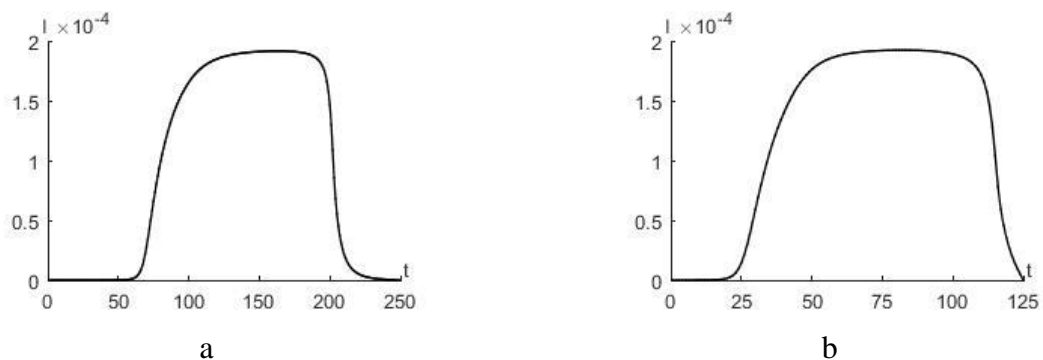


Рис. 4.1.12. Эволюция разности между интенсивностью падающего пучка до взаимодействия с полупроводником и ее величиной внутри полупроводника вблизи его передней грани в центре освещенной зоны $x = 0.5, y = 0.01$: $\Delta I = q_{in} - I(0.5, 0.01, t)$ при $L_q = 100$ (a), 50 (b), 10 (c), 5 (d).



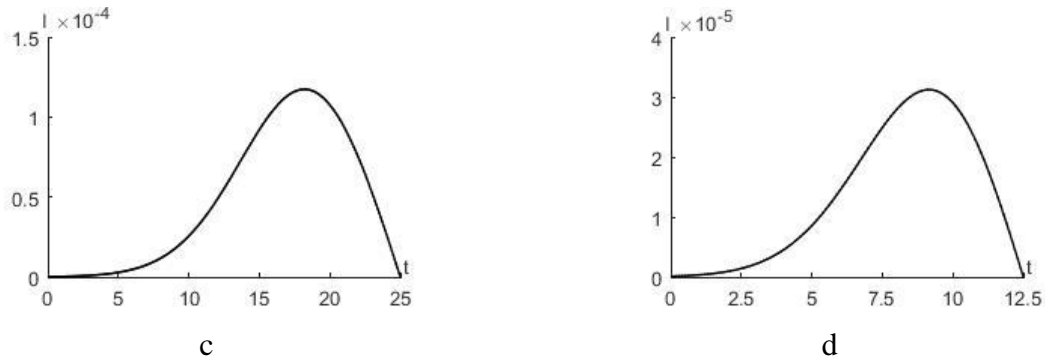


Рис. 4.1.13. Нарушение симметричности оптического импульса внутри полупроводника вблизи его передней грани в центре освещенной зоны ($x = 0.5$, $y = 0.01$) относительно момента времени, когда входящая интенсивность достигает своего максимума: $I = I(0.5, 0.01, t) - I(0.5, 0.01, L_t - t)$, $t \leq L_t / 2$ при $L_q = 100$ (a), 50 (b), 10 (c), 5 (d).

§4.2. Спиральные волны концентрации свободных электронов, индуцированные оптическим излучением в 2D полупроводнике, находящимся во внешнем электрическом поле

Параграф посвящен рассмотрению периодических структур, индуцированных оптическим импульсом в полупроводнике, находящемся во внешнем электрическом поле. Эти структуры возникают вследствие реализации концентрационной ОБ в условиях нелинейного поглощения (коэффициент поглощения задается формулой (1.1.7)). Известно, что в магнитном поле имеют место спиральные волны электронов. В диссертации продемонстрирован новый эффект - спиральное движение в электрическом поле. Под воздействием внешнего электрического поля в полупроводнике формируются сложные динамические пространственно-временные структуры с высокой концентрацией заряженных частиц – спиральные волны.

При работе над параграфом использовались материалы из публикаций автора [A1-A3, A14, A16-A18].

4.2.1. Влияние внешнего электрического поля, действующего в направлении поперечном к направлению распространения оптического излучения, на формирование волн переключения в полупроводнике

Рассмотрим задачу взаимодействия оптического импульса с полупроводником (1.1.1) – (1.1.6) для следующих параметров:

$$\gamma = 10^3, \kappa_x = \kappa_y = 10^{-5}, n_0 = 0.01, \mu_x = \mu_y = 1, \psi = 2.553, \xi = 3, \tau_R = 1, a = 0.1, L_x = L_y = 1. \quad (4.2.1)$$

Для решения данной задачи использовалась консервативная разностная схема (2.1.9) – (2.1.13), реализованная с помощью двухэтапного итерационного процесса (2.4.2) – (2.4.11) на сетке с шагами $h_x = h_y = 0.01$, $\tau = 10^{-3}$ и параметрами $\varepsilon_1 = 10^{-5}$, $\varepsilon_2 = 10^{-7}$ в критерии сходимости (2.4.12).

Для решения уравнения Пуассона использовался метод переменных направлений (2.8.5) с шагом $\tau_p = 10^{-4}$ с критерием сходимости (2.8.8), где $\varepsilon_5 = 10^{-4}$.

На рис. 4.2.1–4.2.3 представлено распределение концентрации свободных электронов для разных значений коэффициента поглощения и максимальной интенсивности падающего пучка (δ_0 , q_0). Под действием оптического излучения внутри полупроводника формируется область с высокой концентрацией заряженных частиц (рис. 4.2.1 a, g, рис. 4.2.2 a, g, рис. 4.2.3 a), на границе которой формируются волны высокой концентрации: наблюдаются пики движущиеся как по направлению распространения оптического излучения (рис. 4.2.1 b), так и навстречу ему (рис. 4.2.1 c). На рис. 4.2.1 можно видеть, как со временем внутри полупроводника начинают формироваться новые домены высокой концентрации свободных электронов, движущиеся к передней грани полупроводника, (рис. 4.2.1 d). Их взаимодействие с основным доменом приводит к формированию новых осцилляций на его боковых границах (рис. 4.2.1 e). При расчетах на длительных временных интервалах можно утверждать, что данный процесс принимает периодический характер (рис. 4.2.1 f).

Присутствие внешнего электрического поля приводит к нарушению симметрии решения и существенно влияет на процесс формирования контрастных пространственно-временных структур (рис. 4.2.1 h, i). В некоторые моменты времени можно наблюдать локальные спиральные структуры (рис. 4.2.1 j). При этом форма и место возникновения новых доменов с

высокой концентрацией заряженных частиц, по сравнению со случаем отсутствия внешнего поля (рис. 4.2.1 е, f), носит более сложный и хаотичный характер (рис. 4.2.1 к, l).

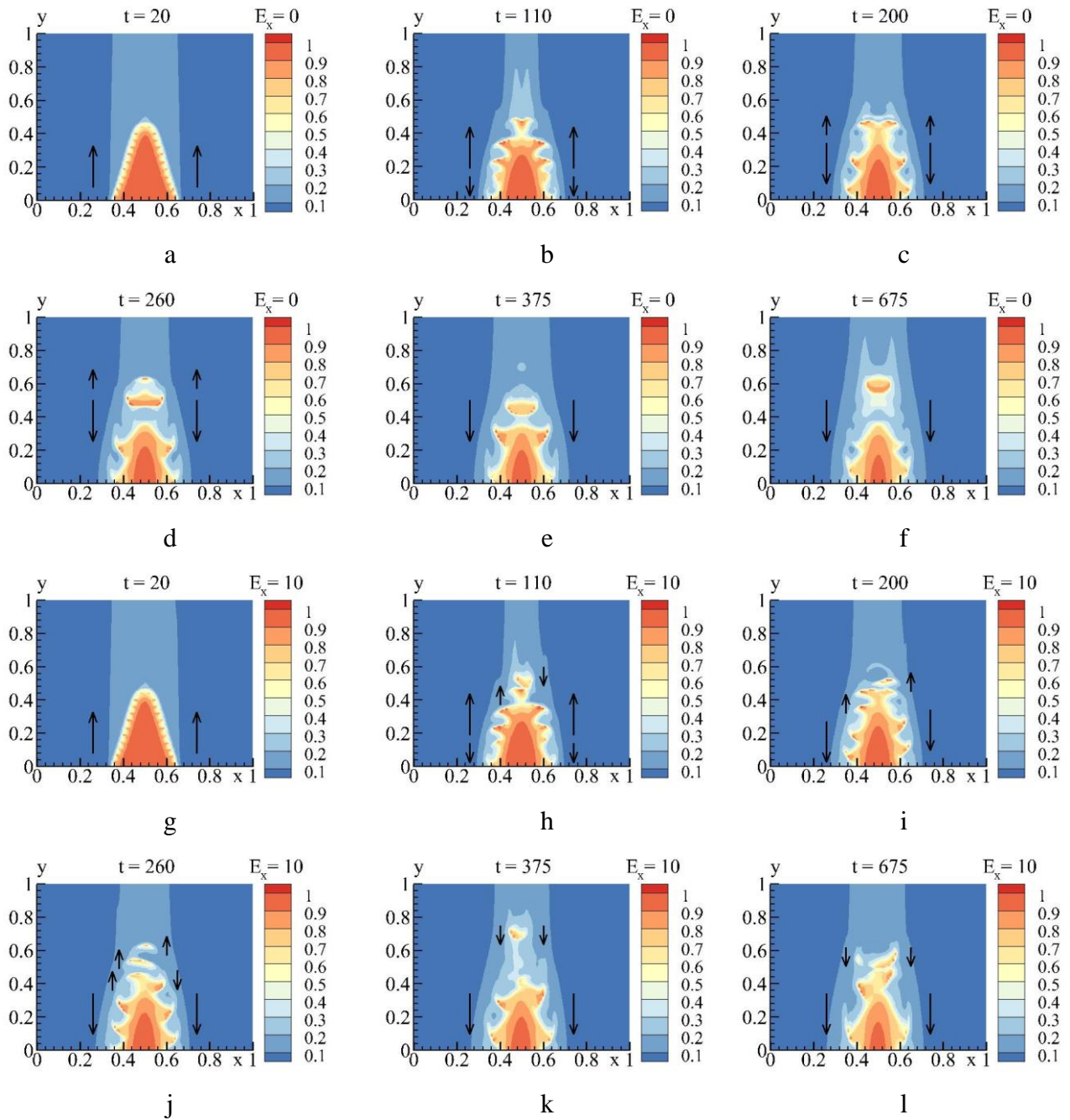
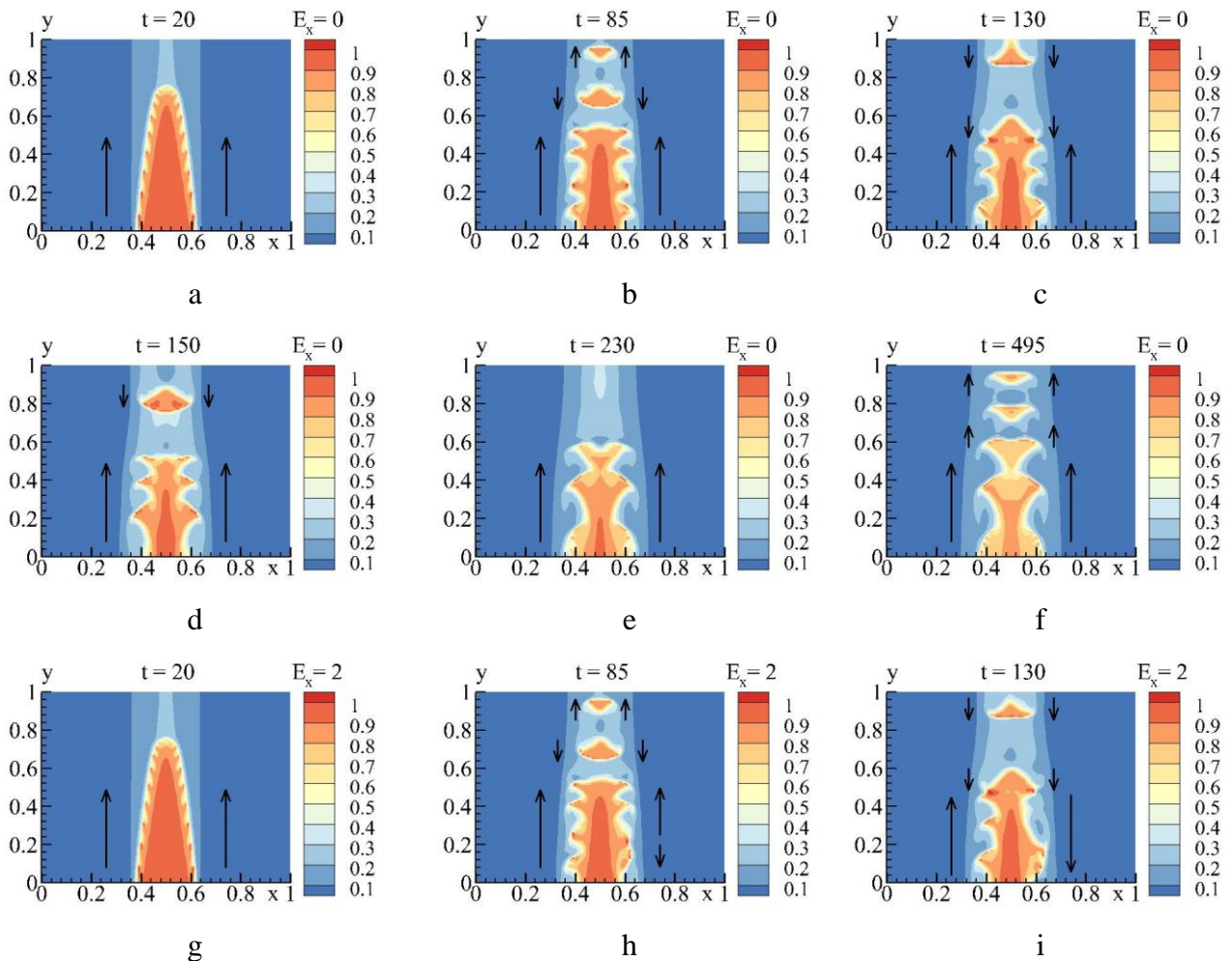


Рис. 4.2.1. Распределение концентрации свободных электронов при значении параметров $\delta_0 = 2$, $q_0 = 1$ и $E_x = 0$ (а – f), $E_x = 10$ (g-l) в моменты времени $t = 20$ (а, g), 110 (b, h), 200 (с, i), 260 (d, j), 375 (е, k), 675 (f, l). Здесь и далее черными стрелками обозначено направление движения доменов с высокой концентрацией.

Распределения, представленные на рис. 4.2.2, получены при расчете с коэффициентом поглощения и максимальной интенсивностью падающего пучка равными $\delta_0 = 0.5$, $q_0 = 0.5$, которые значительно меньше, чем в случае, соответствующем рис. 4.2.1. В этом случае

образование новых доменов высокой концентрации свободных электронов вблизи дальней грани полупроводника происходит существенно раньше (рис. 4.2.2 b), чем в ранее рассмотренном случае (рис. 4.2.1 d). Также на передней грани полупроводника происходит генерация волн, движущихся по направлению распространения лазерного излучения, которые при взаимодействии с доменами, движущимися им на встречу (рис. 4.2.2 c), сливаются с ними (рис. 4.2.2 d). Со временем образование доменов вблизи дальней грани полупроводника прекращается (рис. 4.2.2 e) и в полупроводнике остаются только волны, движущиеся по направлению распространения лазерного излучения и процесс принимает периодический характер (рис. 4.2.2 f).

Наличие внешнего электрического поля, действующего вдоль оси x , оказывает существенное влияние на рассматриваемый процесс: на боковых границах домена высокого поглощения начинают образовываться волны, движущиеся в разных направлениях (как по направлению распространения падающего импульса, так и в противоположном) (рис. 4.2.2 g-j). В результате происходит развитие спиралеобразных структур в различных сечениях полупроводника (рис. 4.2.2 k, l).



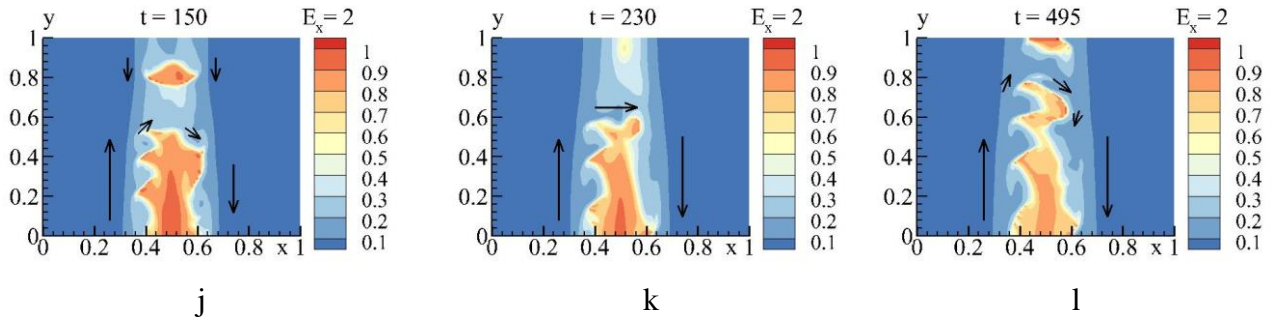


Рис. 4.2.2. Распределение концентрации свободных электронов при значении параметров $\delta_0 = 0.5$, $q_0 = 0.5$ и $E_x = 0$ (a – f), $E_x = 2$ (g-l) в моменты времени $t=20$ (a, g), 85 (b, h), 130 (c, i), 150 (d, j), 230 (e, k), 495 (f, l).

Дальнейшее уменьшение значения входной интенсивности ($q_0 = 0.25$) приводит к тому, что периодические контрастные пространственно-временные структуры не реализуются (рис. 4.2.3): домен высокой концентрации заряженных частиц формируется на передней грани полупроводника, на которую падает оптический импульс (рис. 4.2.3 а, б). При этом новые волны переключения не образуются и, как только существующие волны (рис. 4.2.3 с) достигают границ полупроводника, он полностью переключается в нижнее состояние (рис. 4.2.3 д). Это говорит о том, что верхнее состояние системы в данном режиме неустойчиво. Присутствие внешнего электрического поля по оси x оказывает влияние на форму доменов высокой концентрации заряженных частиц, но не приводит к образованию каких-либо новых структур или эффектов (рис. 4.2.3 е, ф).

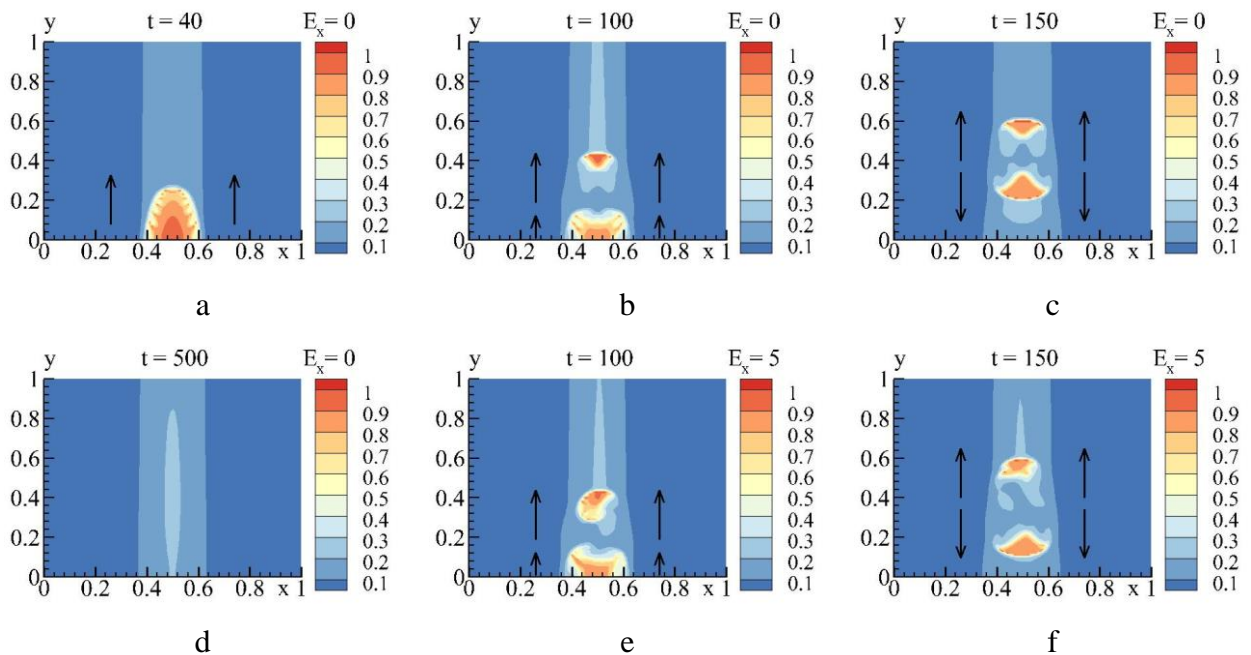
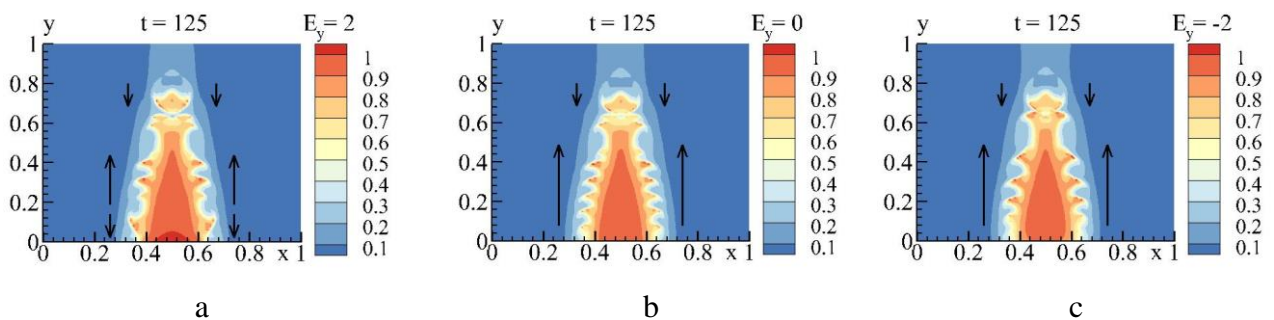


Рис. 4.2.3. Распределение концентрации свободных электронов при значении параметров $\delta_0 = 0.5$, $q_0 = 0.25$, $E_x = 0$ (a – d), $E_x = 5$ (e, f) в моменты времени $t = 40$ (a), 100 (b, e), 150 (c, f), 500 (d).

4.2.2. Влияние внешнего электрического поля, действующего вдоль направления распространения оптического излучения, на формирование волн переключения в полупроводнике

В случае действия внешнего электрического поля в направлении, поперечном направлению распространения оптического излучения, изменение знака внешнего поля приводит к симметричному отображению распределения концентрации заряженных частиц. В случае действия внешнего электрического поля вдоль направления распространения падающего импульса знак соответствующей компоненты волнового вектора приводит к более сложным эффектам (рис. 4.2.4–4.2.6 с параметрами расчета (4.2.1)). К примеру, оно может повлиять на момент времени, в который начинают образовываться волны и домены, движущиеся против направления распространения лазерного импульса (рис. 4.2.4 a, c), количество данных структур (рис. 4.2.4 g, i), место их генерации и форму (рис. 4.2.4 d, f). Тем не менее в рассматриваемых примерах все варианты со временем выходят на качественно аналогичные периодические режимы (рис. 4.2.4 j, l). Кроме этого, внешнее поле, направленное вдоль оси y , влияет на максимум концентрации электронов на грани полупроводника, на которую воздействует импульс (рис. 4.2.5). В частности, поле, действующее по направлению распространения падающего импульса, увеличивает значение концентрации (рис. 4.2.5 a, d), а действующее в обратном направлении - уменьшает (рис. 4.2.5 c, f).



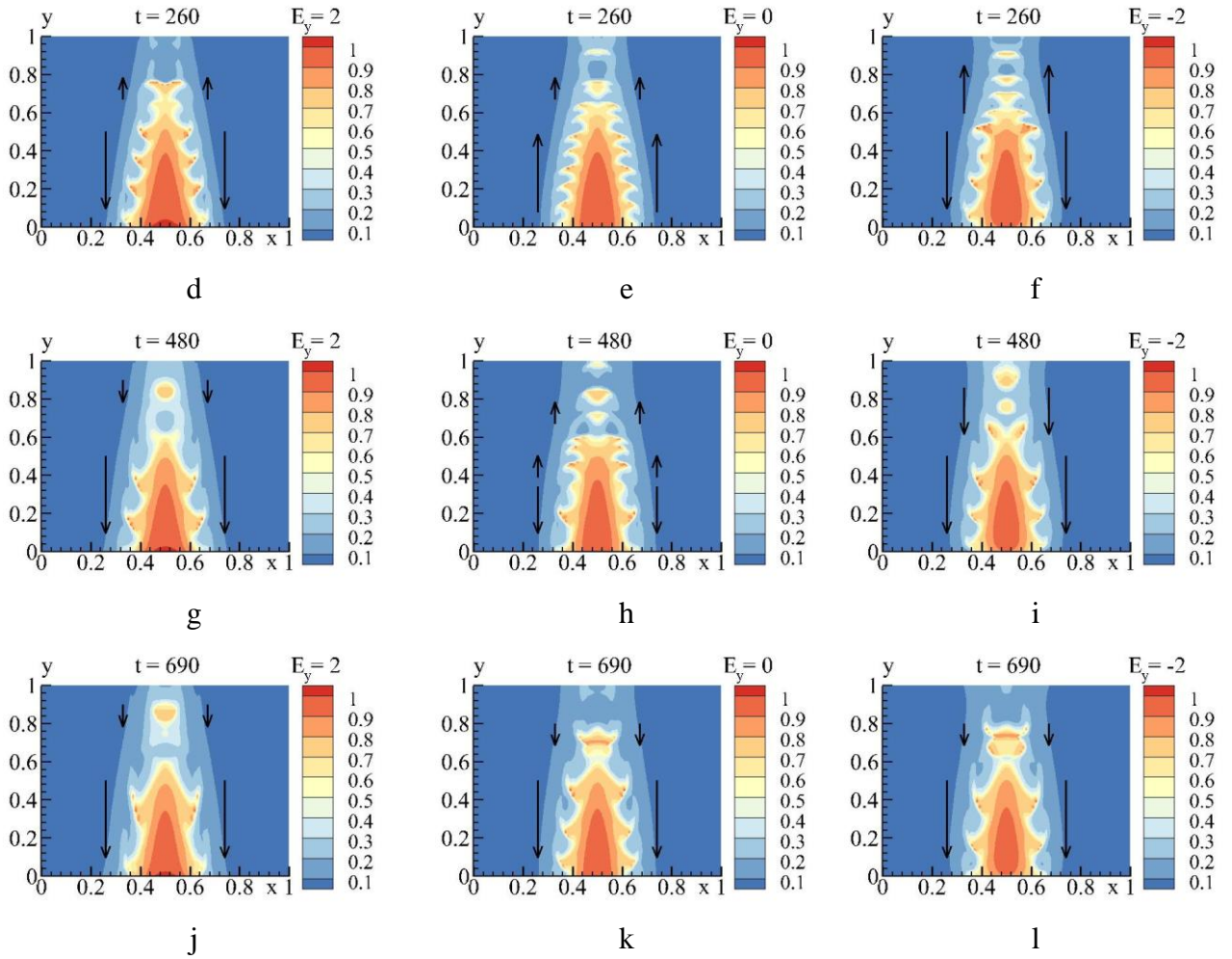


Рис. 4.2.4. Распределение концентрации свободных электронов при значении параметров $\delta_0 = 2$, $q_0 = 1.5$, $E_y = 2$ (a, d, g, j), $E_y = 0$ (b, e, h, k), $E_y = -2$ (c, f, i, l) в моменты времени $t=125$ (a, b, c), 260 (d, e, f), 480 (g, h, i), 690 (j, k, l).

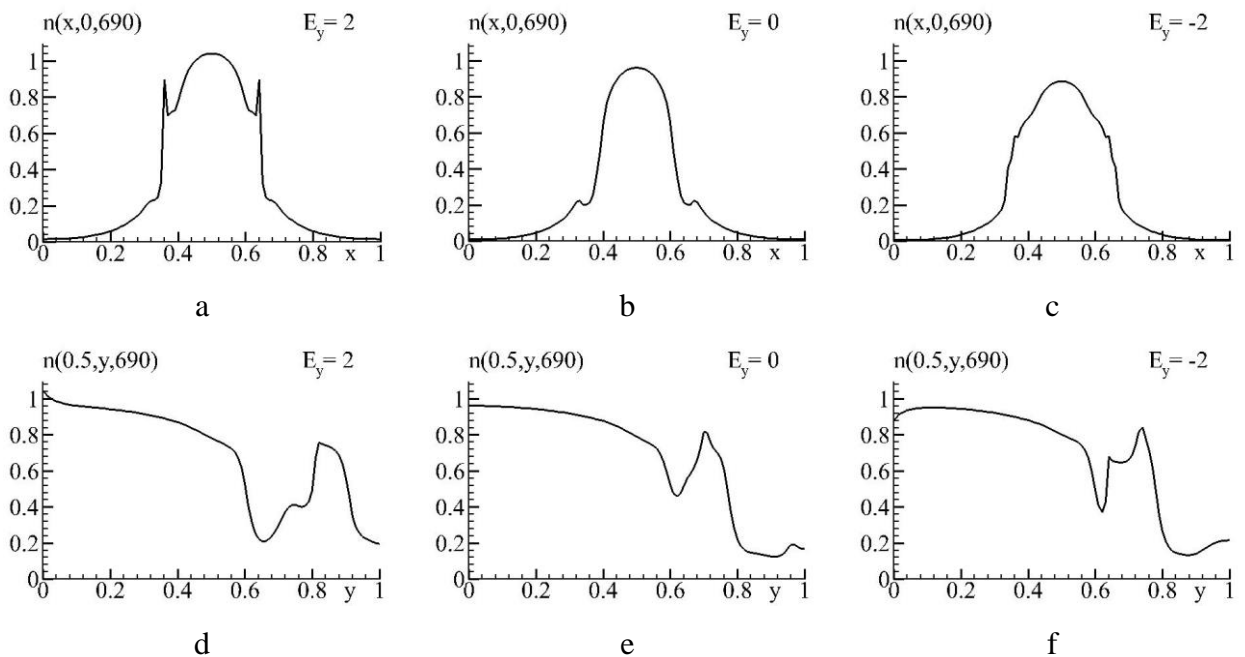
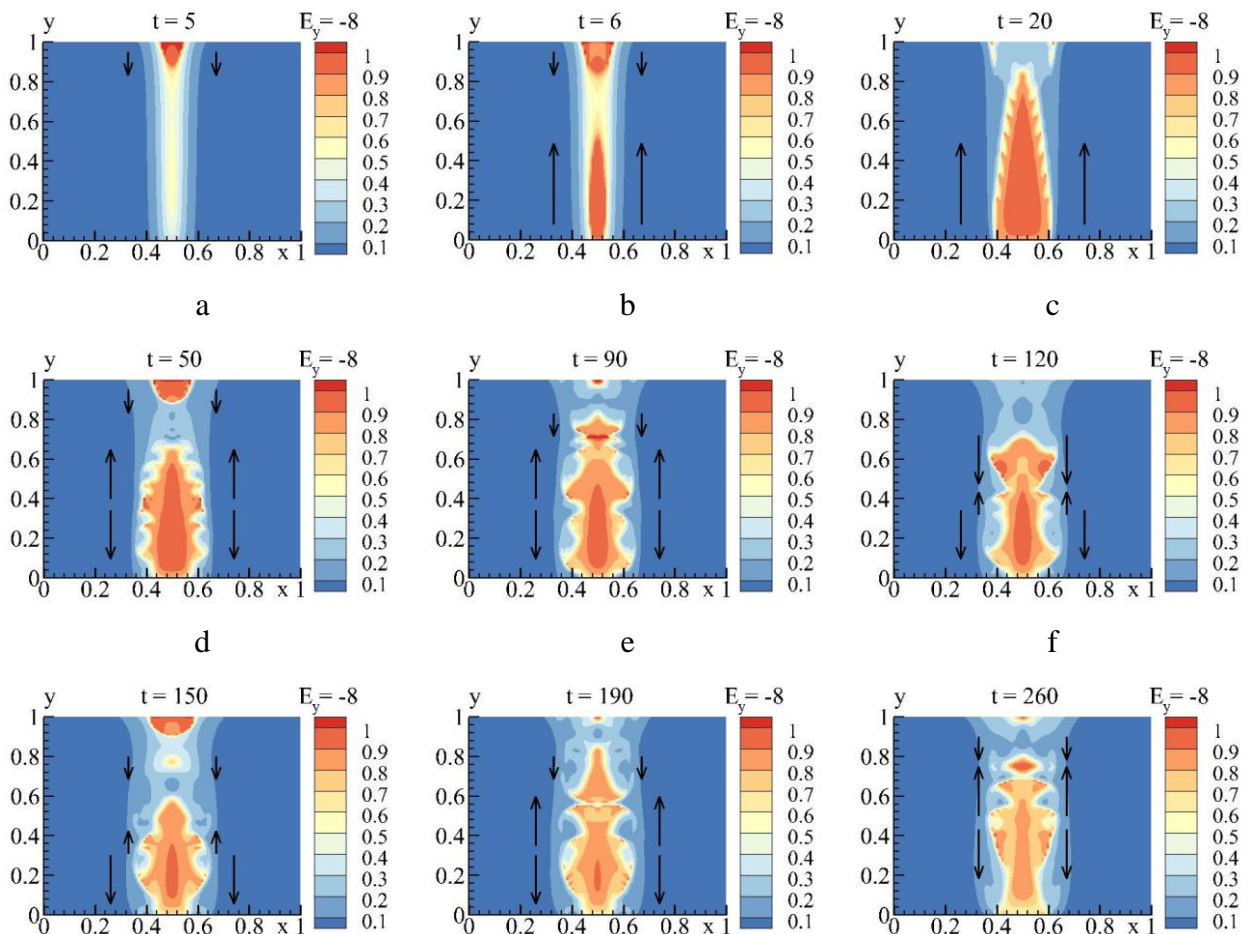


Рис. 4.2.5. Профиль распределения концентрации свободных электронов при $y=0$ (a, b, c) и $x=0.5$ (d, e, f) для значения параметров $\delta_0 = 2$, $q_0 = 1.5$, $E_y = 2$ (a, d), $E_y = 0$ (b, e), $E_y = -2$ (c, f) в момент времени $t=690$.

Более существенное влияние внешнего электрического поля, действующего в направлении обратном направлению распространения лазерного импульса, представлено на рис. 4.2.6, рассчитанного для тех же значений δ_0 , q_0 , что и рис. 4.2.2. В отличие от всех ранее рассмотренных случаев, первый домен высокой концентрации образуется у дальней грани полупроводника (рис. 4.2.6 a) и только после этого начинается формирование домена у передней грани (рис. 4.2.6 b), а ранее образовавшийся домен пропадает под действием поглощения (рис. 4.2.6 c). В дальнейшем подобные домены начинают генерироваться у задней грани полупроводника и двигаться в сторону передней (рис. 4.2.6 d-f), а их размеры значительно превосходят те, что наблюдались в отсутствие внешнего электрического поля (рис. 4.2.2 c, d). В дальнейшем (рис. 4.2.6 g-l) возникает множество сложных структур, образовавшихся в результате постоянного формирования новых доменов, движущихся в разные стороны и взаимодействующих между собой.



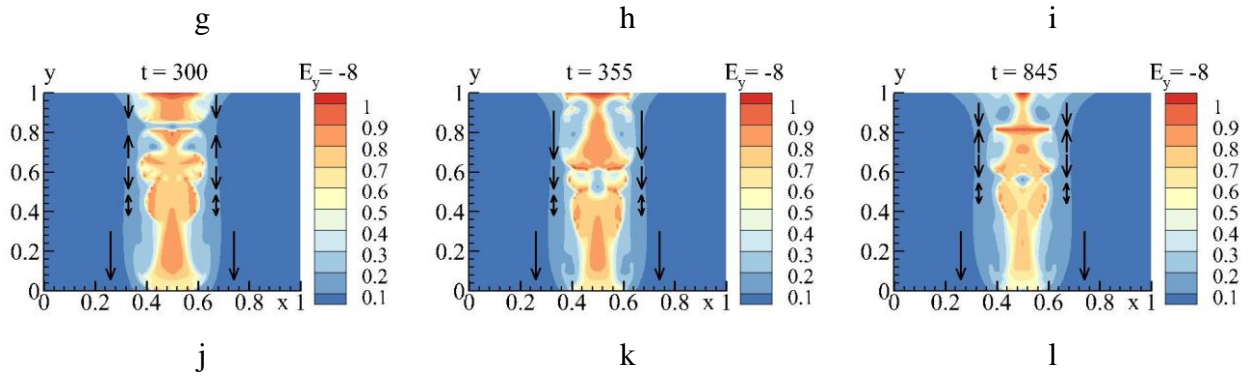
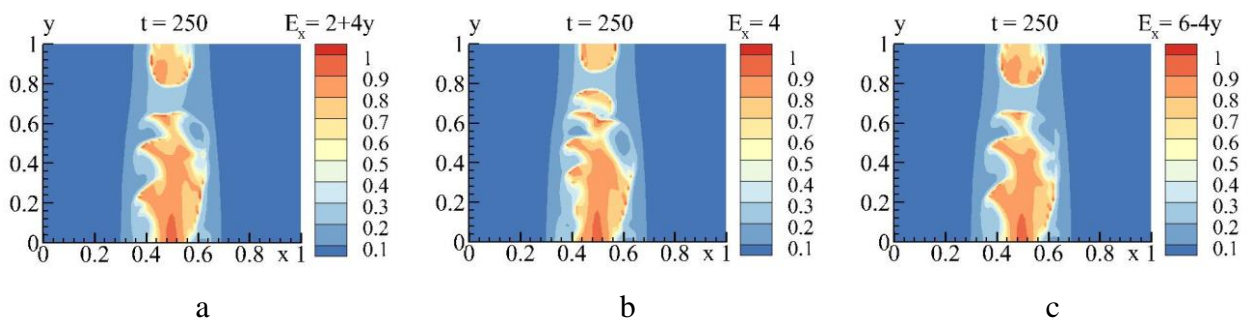


Рис. 4.2.6. Распределение концентрации свободных электронов при значении параметров $\delta_0 = 0.5$, $q_0 = 0.5$, $E_y = -8$ в моменты времени $t=5$ (a), 8 (b), 15 (c), 35 (d), 60 (e), 85 (f), 150 (g), 165 (h), 190 (i), 275 (j), 295 (k), 305 (l), 355 (m), 455 (n), 495 (o).

Отметим, что так как внешнее электрическое поле направлено вдоль направления распространения импульса, то решение должно сохранять симметрию относительно поперечной координаты, что и продемонстрировано на рис. 4.2.4–4.2.6. Это подтверждает работоспособность и точность разработанного в диссертации ТЭИП.

4.2.3. Влияние неоднородного внешнего электрического поля на формирование волн переключения в полупроводнике

На рис. 4.2.7 и 4.2.8 представлены два случая действия внешнего неоднородного поля, линейно зависящего от пространственных координат. Если внешнее электрическое поле, действующее вдоль оси x , определено линейными зависимостями $E_x = 2 + 4y$ (рис. 4.2.7 а, d, g, j) или $E_x = 6 - 4y$ (рис. 4.2.7 с, f, i, l), то в полупроводнике наблюдается формирование динамических спиральных структур.



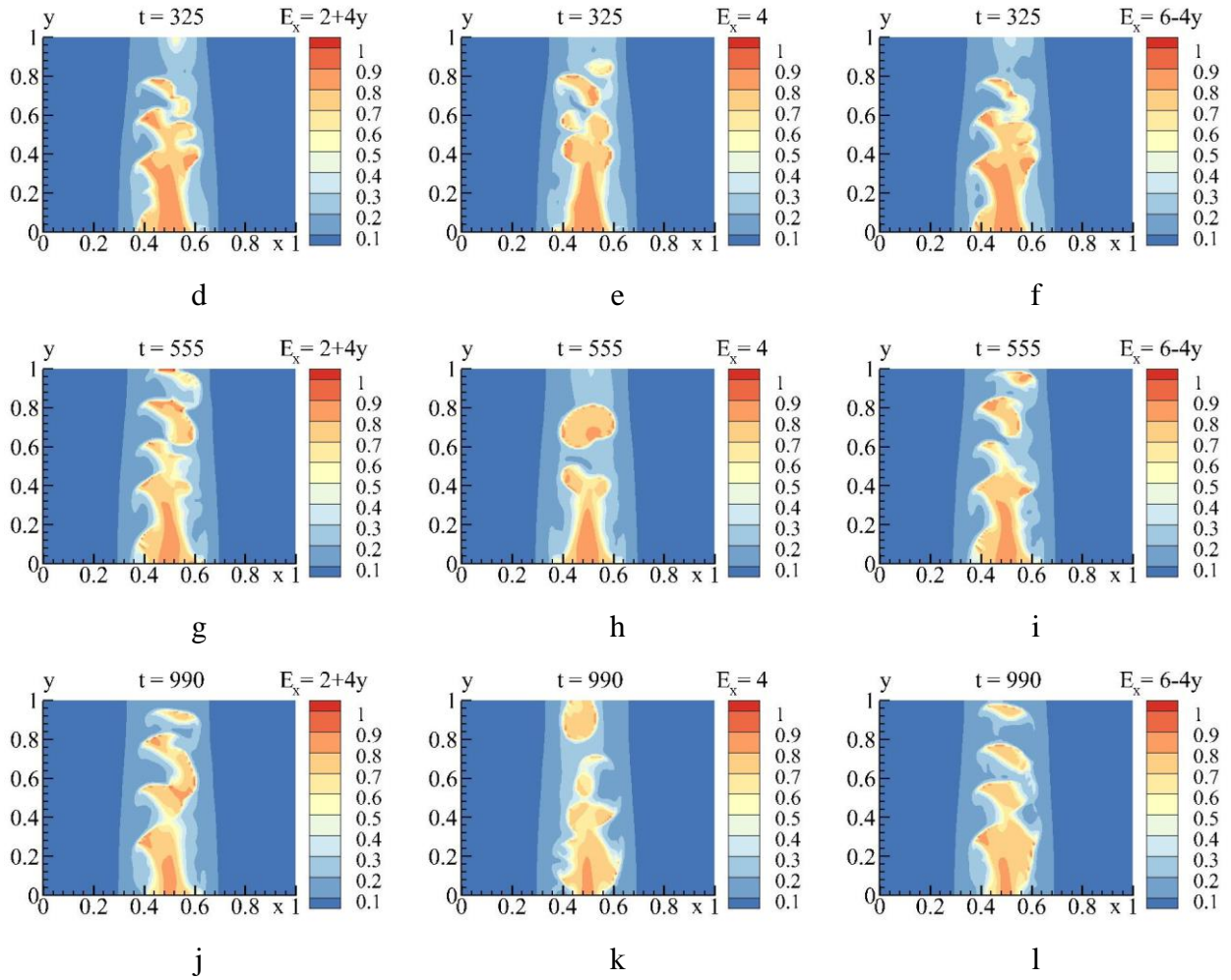
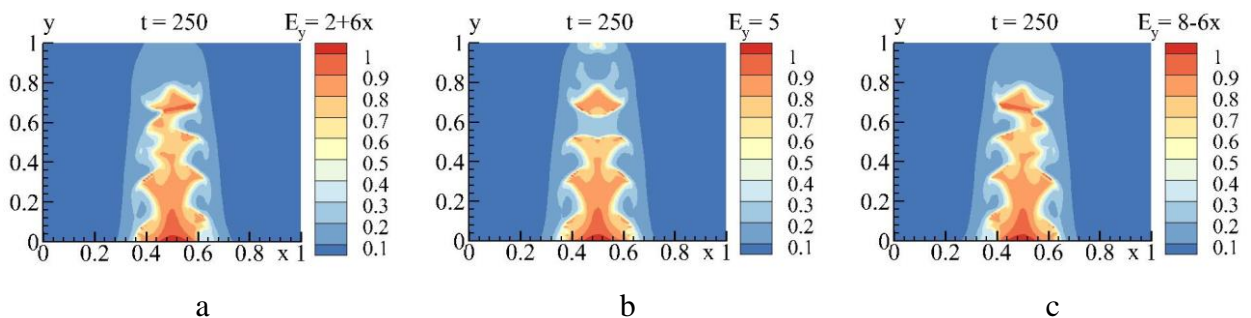


Рис. 4.2.7. Распределение концентрации свободных электронов при значении параметров $\delta_0 = 0.5$, $q_0 = 0.5$, $E_x = 2+4y$ (a, d, g, j), $E_x = 4$ (b, e, h, k), $E_x = 6-4y$ (c, f, i, l), $E_y = 0$ в моменты времени $t = 250$ (a, b, c), 325 (d, e, f), 555 (g, h, i), 990 (j, k, l).

Существенное влияние на режим изменения характеристик полупроводника оказывает и пространственное распределение внешнего электрического поля вдоль оси y . Если внешнее электрическое поле, действующее в этом направлении, определяется формулой $E_y = 2+6x$ (рис. 4.2.8 a, d, g) или $E_y = 8-6x$ (рис. 4.2.8 c, f, i), можно наблюдать периодические волнообразные структуры.



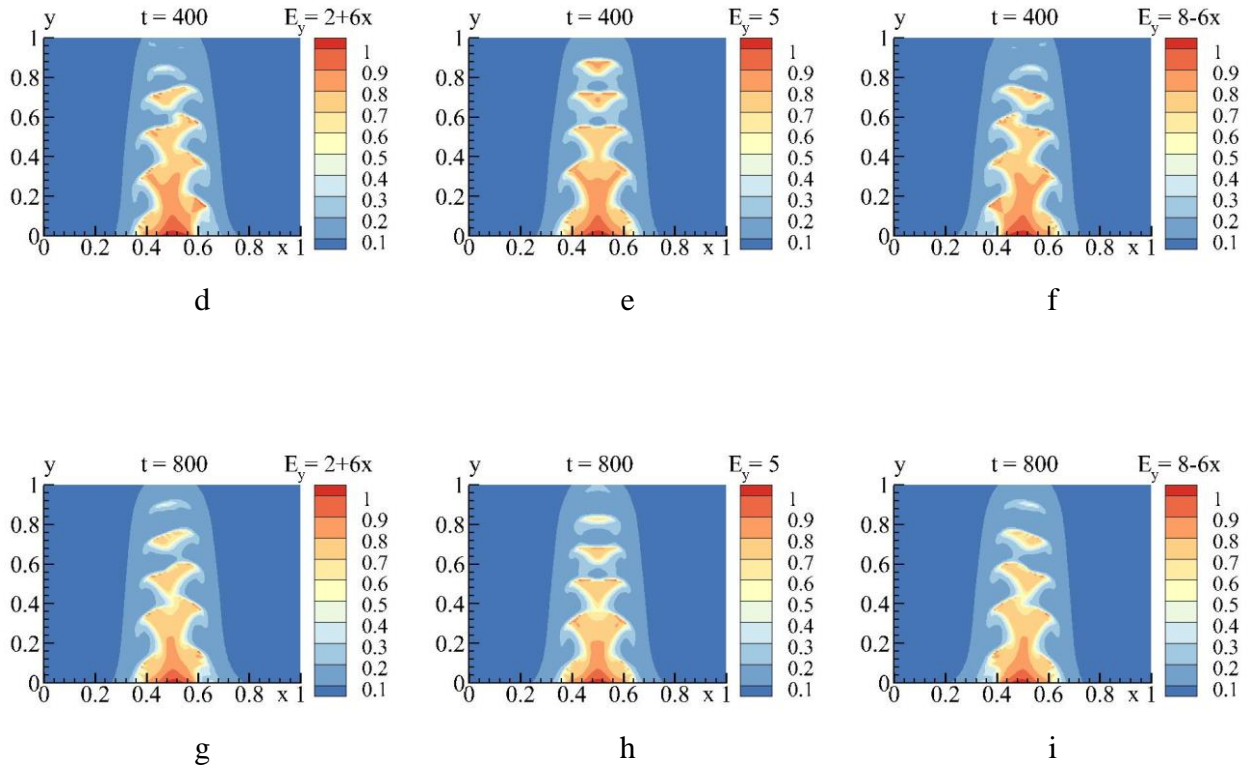


Рис. 4.2.8. Распределение концентрации свободных электронов при значении параметров $\delta_0 = 0.5$, $q_0 = 0.5$, $E_x = 0$, $E_y = 2+6x$ (a, d, g), $E_y = 5$ (b, e, h), $E_y = 8-6x$ (c, f, i) в моменты времени $t = 250$ (a, b, c), 400 (d, e, f), 800 (g, h, i).

4.2.4 Влияние коэффициента подвижности электронов на формирование волн переключения в полупроводнике

Изменение соотношения между коэффициентами подвижности может оказывать существенное влияние на формирование пространственных структур. На рис. 4.2.9 представлены распределение концентрации свободных электронов для параметров, аналогичных используемым при построении рис. 4.2.4 (a, d, g, j) ($\delta_0 = 2$, $q_0 = 1.5$, $E_y = 2$), но при разных соотношениях коэффициентов подвижности по осям и с добавлением внешнего поля по оси x ($E_x = 2$). При этом, если $\mu_x \gg \mu_y$ (с, f, i, l), образуются спиральные волны полупроводниковой плазмы под действием внешнего электрического поля, которые не наблюдались при других соотношения подвижности (рис. 4.2.9 a, d, g, j). Так же стоит отметить, что направление их движения противоположно направлению, изображенному на рис. 4.2.2.

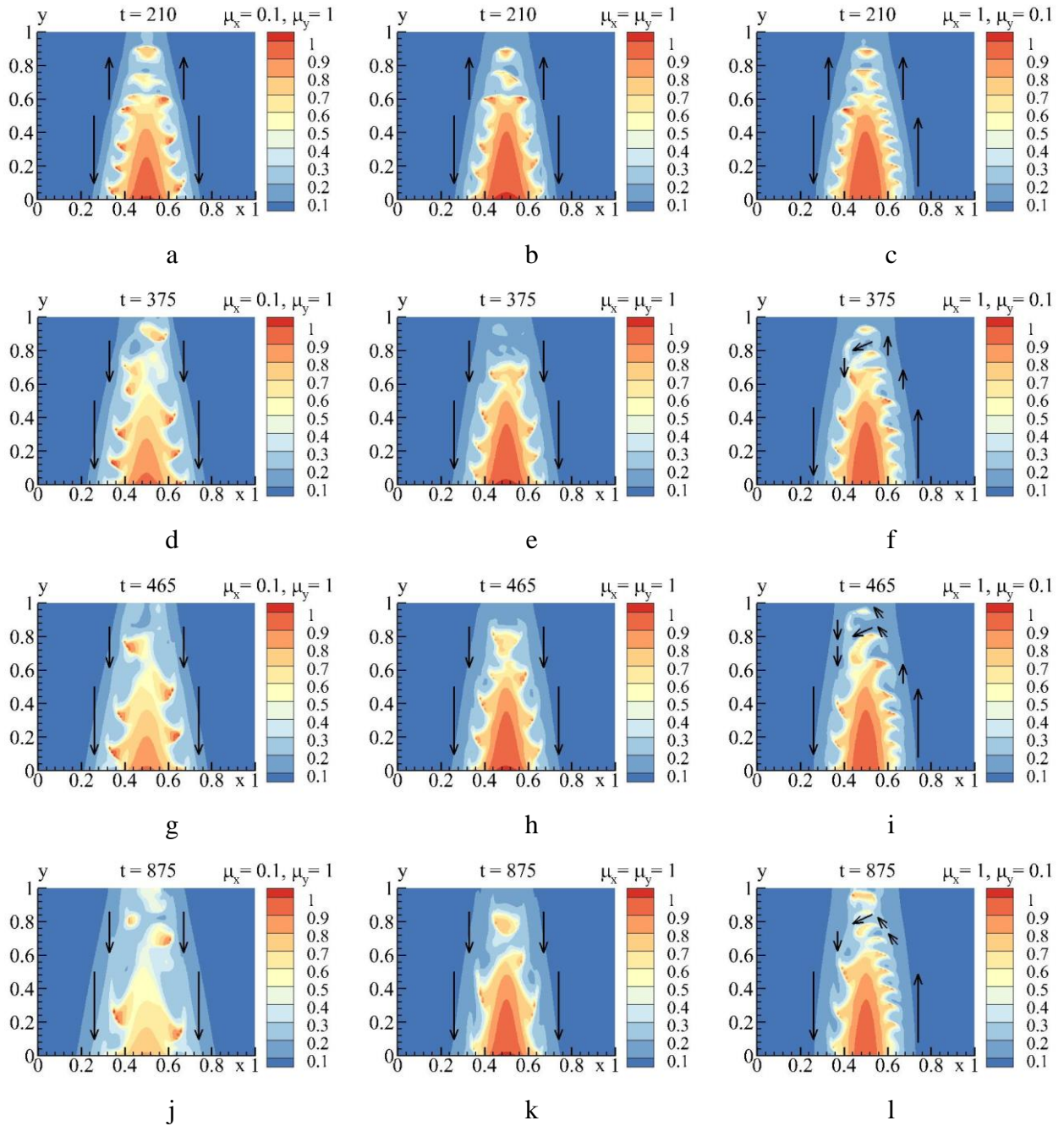


Рис. 4.2.9. Распределение концентрации свободных электронов при значении параметров $\delta_0 = 2$, $q_0 = 1.5$, $E_x = 2$, $E_y = 2$, $\mu_x = 0.1$, $\mu_y = 1$ (a, d, g, j), $\mu_x = \mu_y = 1$ (b, e, h, k), $\mu_x = 1$, $\mu_y = 0.1$ (c, f, i, l) в моменты времени $t = 210$ (a, b, c), 375 (d, e, f), 465 (g, h, i), 875 (j, k, l).

§4.3. Компьютерное моделирование 3D пространственно-временных структур, реализующихся в полупроводнике под воздействием оптического импульса

В параграфе обсуждаются результаты компьютерного моделирования 3D задачи взаимодействия оптического импульса с полупроводником (1.2.1) – (1.2.6). Также, как и в 2D случае, при определенных параметрах взаимодействия в системе развиваются пространственно-временные структуры высокой концентрации заряженных частиц.

При работе над параграфом использовались материалы из публикаций автора [A11, A13].

На рис. 4.3.1 продемонстрирована динамика формирования периодических доменов высокой концентрации свободной электронов для концентрационной модели (1.1.7), полученных при расчете с параметрами:

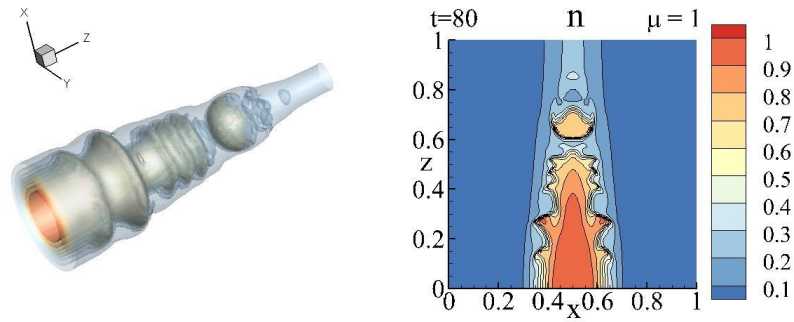
$$\gamma = 10^3, \kappa_x = \kappa_y = \kappa_z = 10^{-5}, n_0 = 0.01, \mu_x = \mu_y = \mu_z = 1, \psi = 2.553, \xi = 3, \delta_0 = 2, q_0 = 1.5, \\ E_x = E_y = E_z = 0, \tau_R = 1, a = 0.1, L_x = L_y = L_z = 1.$$

Для численного решения задачи использовалась консервативная разностная схема (2.3.4) – (2.3.8), реализованная с помощью трехэтапного итерационного процесса (2.6.2) – (2.6.15) на сетке с шагами $h_x = h_y = h_z = 0.01$, $\tau = 10^{-3}$ и параметрами $\varepsilon_1 = 10^{-5}$, $\varepsilon_2 = 10^{-7}$ в критерии сходимости (2.6.16). Для решения уравнения Пуассона использовался итерационный метод (2.8.9) – (2.8.10) с шагом $\tau_p = 10^{-4}$ и параметром $\varepsilon_5 = 10^{-4}$ в критерии сходимости (2.8.13).

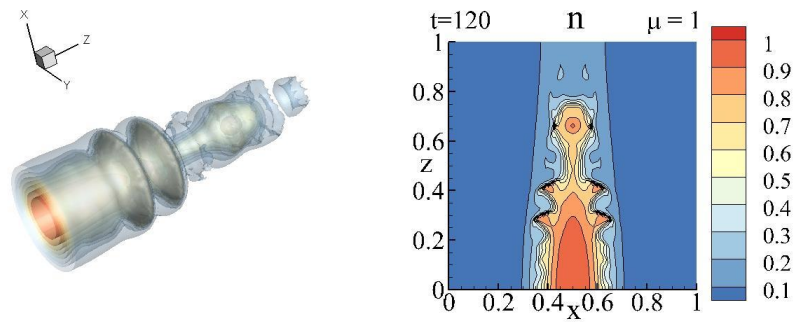
При проведении расчетов использовались такие же значения параметров, что и в 2D случае, соответствующем рис. 4.2.4 (b, e, h, k). Для 3D задачи на рис. 4.3.1 и 4.3.2 продемонстрировано образование доменов высокой концентрации заряженных частиц, имеющих сложную пространственно-временную структуру. Исследование таких режимов имеет важное практическое значение для определения надежности ОБ системы.

Стоит отметить, что инвариант (рис. 4.3.3) при использовании ТЭИП (2.6.2) – (2.6.15) сохраняется с высокой точностью (10^{-12}): его значение на несколько порядков ниже порядка аппроксимации разностной схемы (2.3.4) – (2.3.7). Таким образом, несмотря на незначительный рост на один порядок на временном отрезке в 500 безразмерных единиц, можно считать, что требование консервативности схемы выполняется. Отметим, что в условии отсутствия внешнего

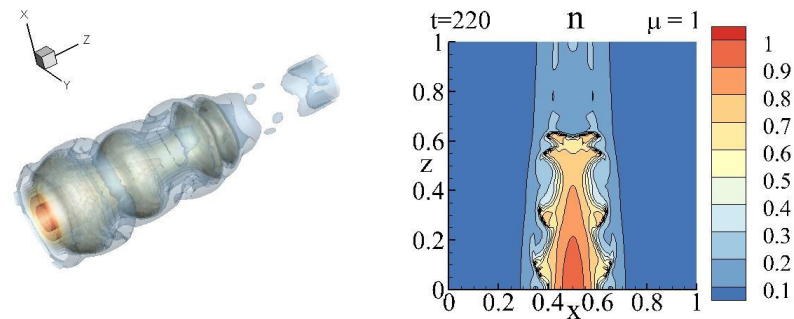
электрического поле решение 3D задачи сохраняет симметрии, что говорит об асимптотической устойчивости ТЭИП.



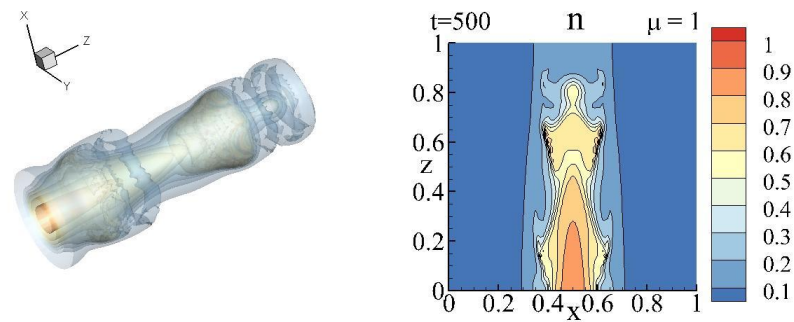
a



b



c



d

Рис. 4.3.1. Динамика формирования доменов высокой концентрации свободных электронов в 3D случае для концентрационной модели: $t=80$ (a), 120 (b), 220 (c), 500 (d).

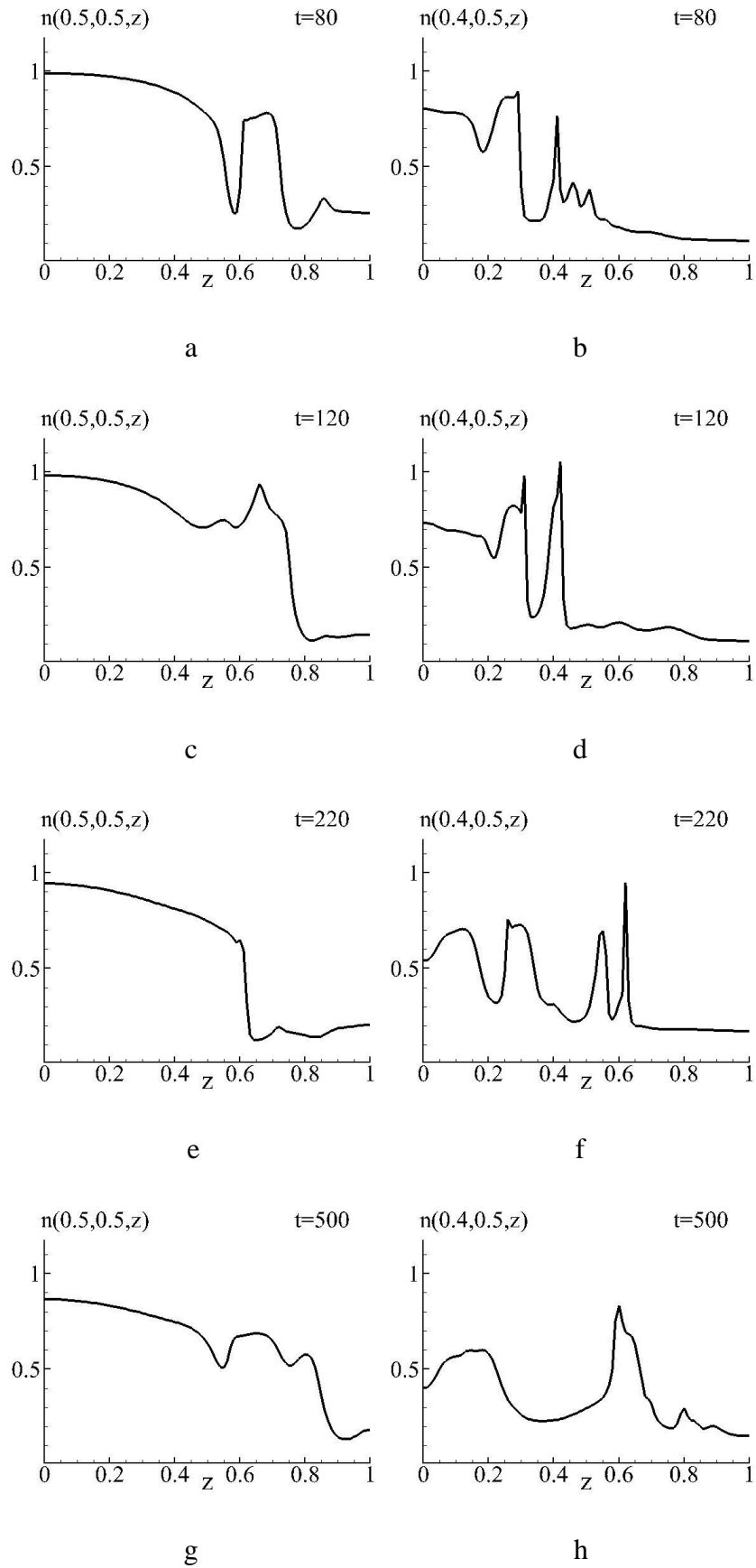


Рис. 4.3.2. Распределение концентрации свободных электронов вдоль оси z в центре полупроводника относительно продольной координаты u и в разных сечениях по поперечной координате x : $x=0.4$ (а, с, е, г), $x=0.5$ (b, d, f, h).

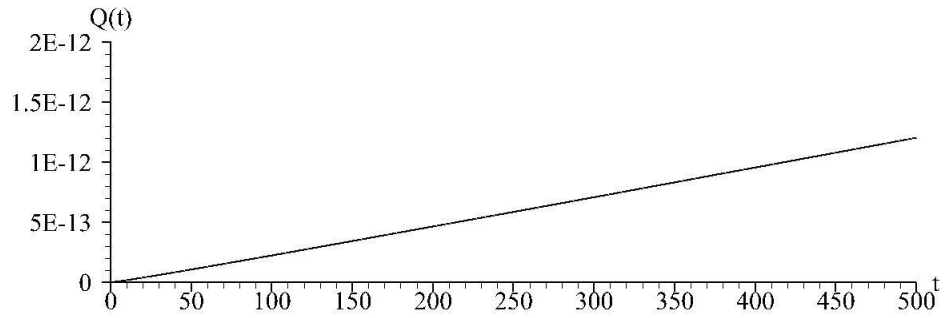
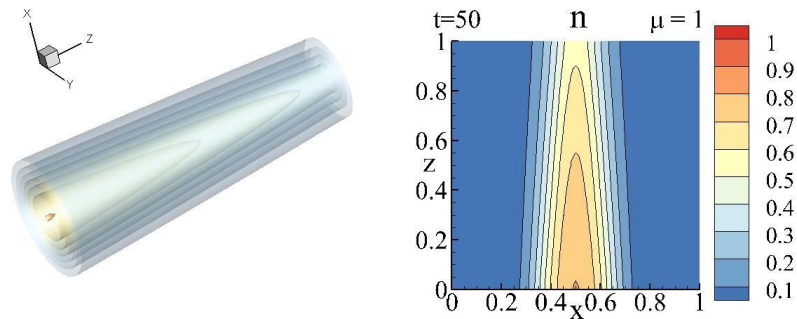


Рис. 4.3.3. Эволюция инварианта (2.3.11).

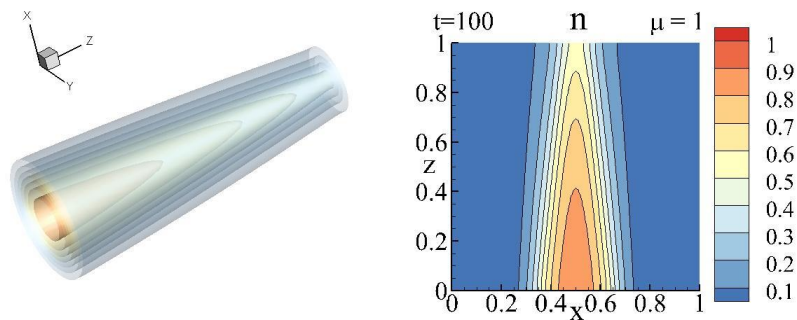
На рис. 4.3.4 продемонстрирована динамика формирования постоянного домена высокой концентрации свободной электронов для полевой модели (1.1.8), полученных при расчете с параметрами:

$$\gamma = 10^3, \kappa_x = \kappa_y = \kappa_z = 10^{-5}, n_0 = 0.01, \mu_x = \mu_y = \mu_z = 1, \alpha = 0, \beta = 3, \delta_0 = 2, q_0 = 1.5, \\ E_x = E_y = E_z = 0, \tau_R = 1, a = 0.1, L_x = L_y = L_z = 1.$$

В отличие от концентрационной модели (рис. 4.3.1), в данном случае домен с высокой концентрацией имеет простую форму и со временем не происходит формирования новых доменов.



a



b

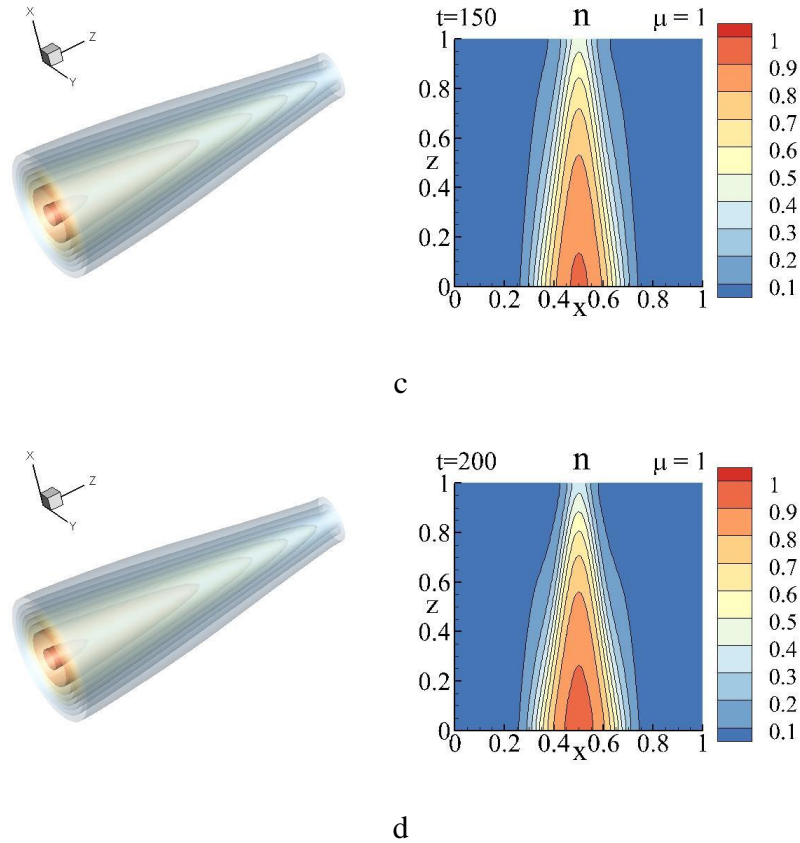


Рис. 4.3.4. Динамика формирования доменов высокой концентрации свободных электронов в 3D случае для полевой модели: $t=50$ (a), 100 (b), 150 (c), 200 (d).

§4.4. Роль продольной дифракции при формировании контрастных структур полупроводниках: нелинейная градиентная оптика

В данном параграфе представлены результаты моделирования для случая, описанного в п.1.1.2: распространение оптического импульса в нелинейной среде описывается уравнением Шредингера относительно амплитуды падающего импульса. Как было продемонстрировано выше в параграфах 4.1–4.3, при определенных параметрах взаимодействия в полупроводнике формируются индуцированные оптическим импульсом домены высокого поглощения, имеющие большие градиенты на границах. Очевидно, что учет отражения падающего импульса от границы этих доменов существенно увеличивает точность математической модели.

Рассмотрим 2D задачу распространения оптического импульса в полупроводнике с учетом дифракционных эффектов (1.1.1) – (1.1.3), (1.1.5) – (1.1.6), (1.1.12) – (1.2.14). Для численного решения этой задачи использовалась консервативная разностная схема (2.1.9) –

(2.1.11), (2.1.13), (2.1.19) – (2.1.21), реализованная с помощью двухэтапного итерационного процесса (2.4.2) – (2.4.4), (2.4.7) – (2.4.9), (2.4.14) – (2.4.17) на сетке с шагами $h_x = h_y = 0.01$, $\tau = 10^{-3}$ и параметрами $\varepsilon_1 = 10^{-5}$, $\varepsilon_2 = 10^{-7}$ в критерии сходимости (2.4.12).

Для решения уравнения Пуассона использовался метод переменных направлений (2.8.5) с шагом $\tau_p = 10^{-4}$ и параметром $\varepsilon_5 = 10^{-4}$ в критерии сходимости (2.8.8).

При работе над параграфом использовались материалы из публикаций автора [А7, А8, А12, А14].

4.4.1. Отражение оптического импульса от фиксированного домена высокого поглощения

Сначала рассмотрим модель с коэффициентом поглощения, не зависящим от характеристик падающего излучения, который задается следующей функцией:

$$\delta(x, y) = \frac{1}{2} \left(1 + \operatorname{th} \left(15(y_0 - y) \right) \right) e^{-\frac{(x-0.5L_x)^2}{a_1^2}}, \quad y \geq 0, a_1 = \begin{cases} 0.1 \left(1 - \frac{(1-1/5)y}{y_0} \right), & 0 \leq y \leq y_0, \\ 0.1 \cdot 1/5, & y > y_0, \end{cases} \quad (4.4.1)$$

где $y_0 = 0.6$ – глубина области с высоким поглощением. Ширина данной области уменьшается с ростом координаты y . Распределение коэффициента поглощения (4.4.1) представлено на рис. 4.4.1.

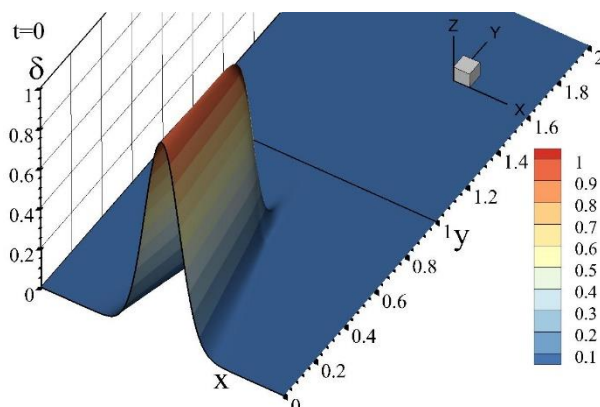


Рис. 4.4.1. Фиксированный домен высокого поглощения, заданный формулой (4.4.1).

Распространение оптического импульса описывается уравнением Шредингера (1.1.12) с коэффициентом поглощения (4.4.1):

$$\frac{\partial A}{\partial t} + iD_x \frac{\partial^2 A}{\partial x^2} + iD_y \frac{\partial^2 A}{\partial y^2} + \frac{\beta_A \delta_0}{2} \delta(x, y) A = 0, \quad 0 < x < L_x, \quad -L_y < y < L_y, \quad t > 0. \quad (4.4.2)$$

Рассмотрим задачу (4.4.1) – (4.4.2) в области $L_x = 1$, $L_y = 30$ для следующего набора параметров:

$$D_x = 10^{-5}, \quad \chi = 5, \quad D_y = 1/(4\pi\chi) \approx 0.016, \quad \beta_A = \pi\chi \approx 15.7, \quad \delta_0 = 0.25,$$

с однородными граничными условиями и начальным распределением, заданным формулой (1.1.13) (рис. 4.4.2).

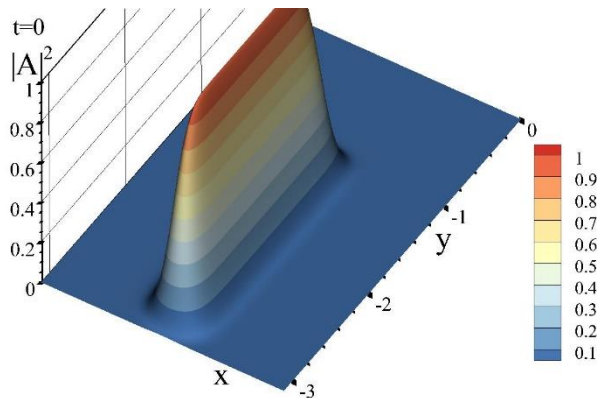
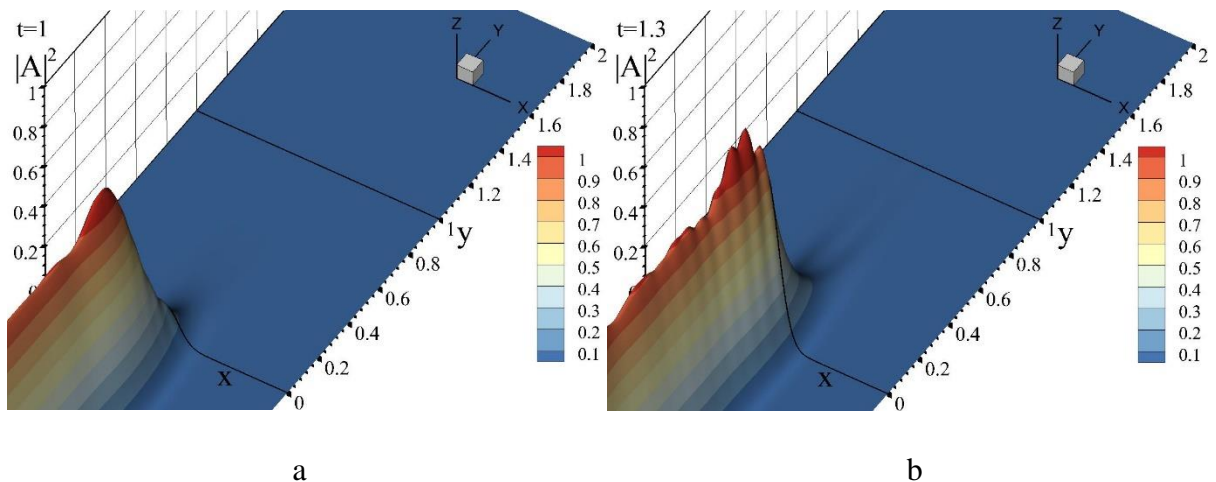


Рис. 4.4.2 Начальное распределение интенсивности оптического импульса, описываемое формулой (1.1.13).

На рис. 4.4.3 представлена динамика изменения интенсивности оптического импульса при его взаимодействии с доменом высокого поглощения. Как видно из графиков, в центре освещенной зоны ($x \sim 0.5 \cdot L_x$) при входе в полупроводник часть импульса отражается от границы домена высокого поглощения, возникает интерференция между падающей и отраженной волнами, что выражается в возникновении осцилляций (рис.4.4.3 б-е). Интенсивность прошедшей в полупроводник части импульса из-за высокого поглощения быстро уменьшается (рис.4.4.3 ф).



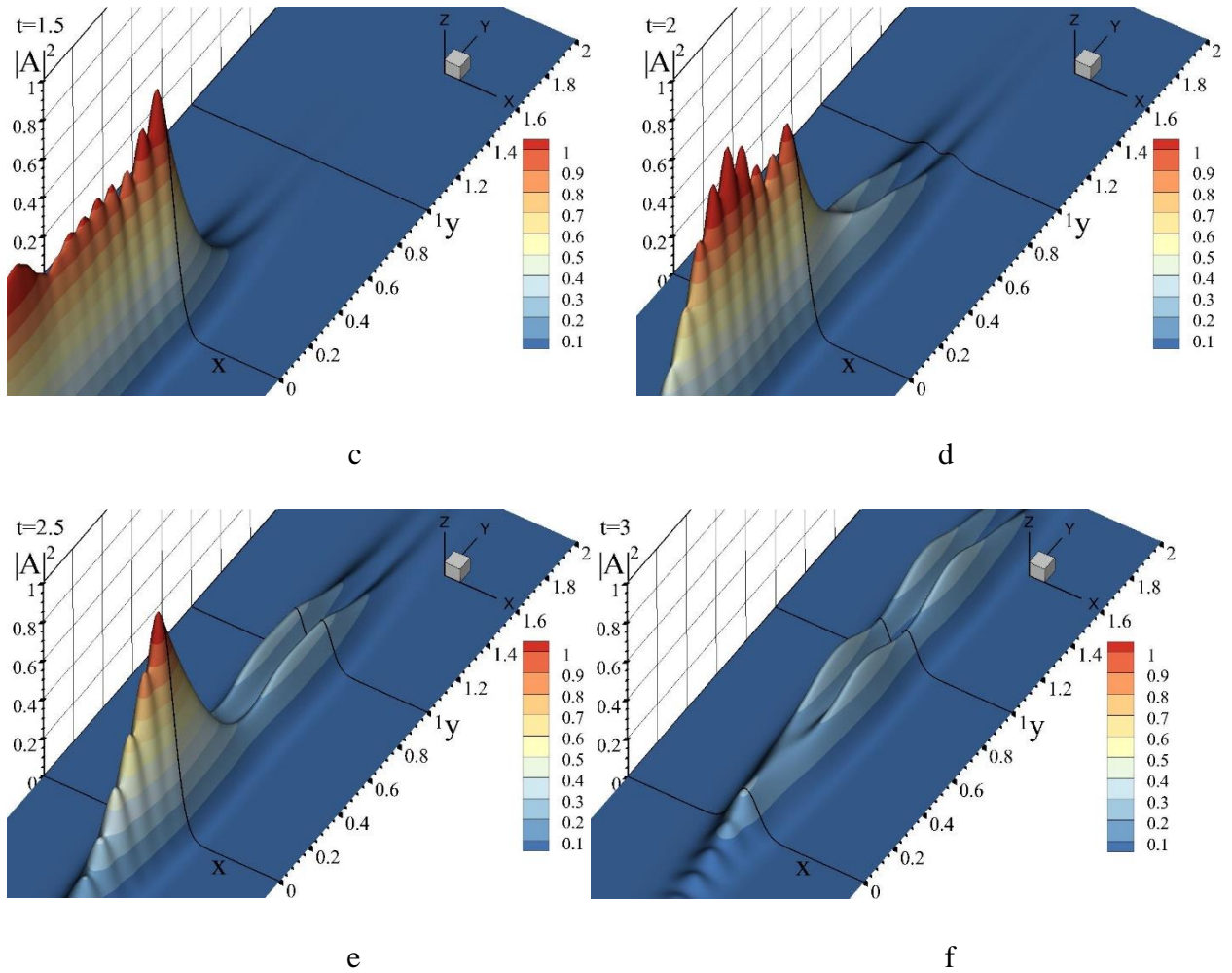


Рис. 4.4.3. Эволюция интенсивности оптического импульса при взаимодействии с доменом высокой концентрации. Изображены распределения интенсивности в моменты времени: $t=1$ (a), 1.3 (b), 1.5 (c), 2 (d), 2.5 (e), 3 (f).

4.4.2. Отражение оптического импульса от домена высокого поглощения, индуцированного им же

Выше было продемонстрировано, что оптический импульс отражается от границы фиксированного домена высокого поглощения. Теперь перейдем к рассмотрению случая, когда контрастные структуры индуцируются в полупроводнике самим падающим импульсом: система уравнений (1.1.1) – (1.1.3), (1.1.5) – (1.1.6), (1.1.12), коэффициент поглощения задается формулой (1.1.7).

Для выявления роли продольной дифракции проведено сравнение со случаем описания распространения оптического импульса уравнением Шредингера, но без слагаемого, включающего в себя вторую производную от амплитуды по продольной координате:

$$\frac{\partial A}{\partial t} + iD_x \frac{\partial^2 A}{\partial x^2} + \frac{\partial A}{\partial y} + \frac{\beta_A \delta_0}{2} \delta(n, N, \varphi) A = 0, \quad 0 < x < L_x, \quad -L_y < y < L_y, \quad t > 0, \quad (4.4.4)$$

с однородными граничными условиями и начальным распределением:

$$A|_{t=0} = A_0 = e^{-\left(\frac{x-L_{xc}}{a_x^2}\right)^2 - \left(\frac{y-L_{yc}}{a_y^2}\right)^2}. \quad (4.4.5)$$

Моделирование проводилось для следующих значений параметров:

$$\begin{aligned} \gamma = 10^3, \quad \kappa_x = \kappa_y = 10^{-5}, \quad n_0 = 0.01, \quad \mu_x = \mu_y = 1, \quad \psi = 2.553, \quad \xi = 3, \quad \tau_R = 1, \quad a_x = 0.1, \quad a_y = 0.1, \\ D_x = 10^{-5}, \quad D_y \approx 0.016, \quad q_0 = 4, \quad \delta_0 = 0.25, \quad \chi = 5, \quad \beta_A = \pi\chi \approx 15.7, \quad L_x = 1, \quad L_y = 30. \end{aligned} \quad (4.4.6)$$

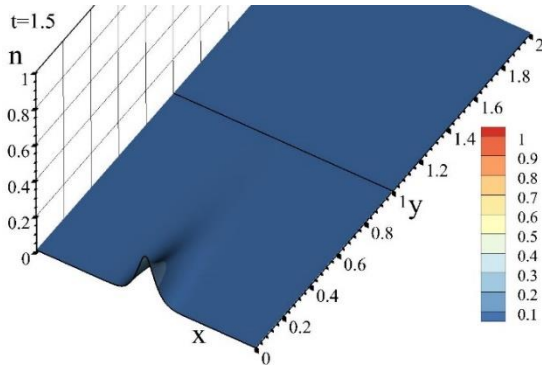
Уравнение Шредингера решалось в области $[-30; 30]$. Отметим, что для более наглядной визуализации на графиках отображена только часть расчетной области.

На рис. 4.4.4 и рис. 4.4.5 продемонстрированы эволюция концентрации свободных электронов n и интенсивности оптического импульса $|A|^2$ соответственно. Графики в левых колонках соответствуют случаю учета продольной дифракции, в правой – при ее отсутствии.

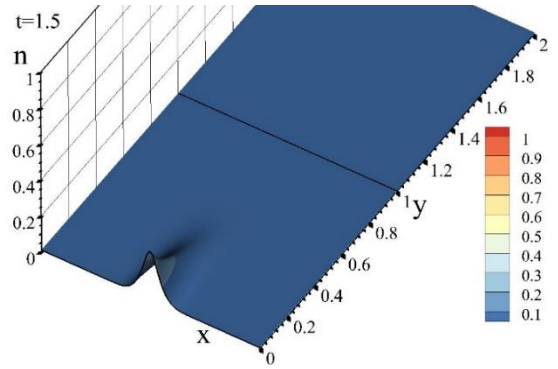
Домен высокого поглощения формируется с определенной задержкой относительно распространения фронта импульса. Таким образом, часть импульса сначала проникает в полупроводник (рис. 4.4.5 a1, a2) и только после этого начинается рост концентрации свободных электронов (рис. 4.4.4 a1, a2), что приводит к формированию домена высокого поглощения (рис. 4.4.4 b1, b2). Таким образом, отражение падающего импульса происходит уже внутри полупроводника (рис. 4.4.5 b1). Отраженная часть импульса распространяется в направлении, противоположном направлению распространения падающего импульса, что приводит к интерференции между волнами и вызывает осцилляции интенсивности (рис. 4.4.5 c1). Если же математическая модель не учитывает влияние продольной дифракции, то отражения от домена высокой концентрации внутри полупроводника не происходит - мы видим прохождение оптического импульса через среду с нелинейным поглощением (рис.4.4.4 и рис.4.4.5 правая колонка).

Для еще более наглядной демонстрации различий, при использовании разных математических моделей (с учетом продольной дифракции и без нее), на рис 4.4.6 представлено

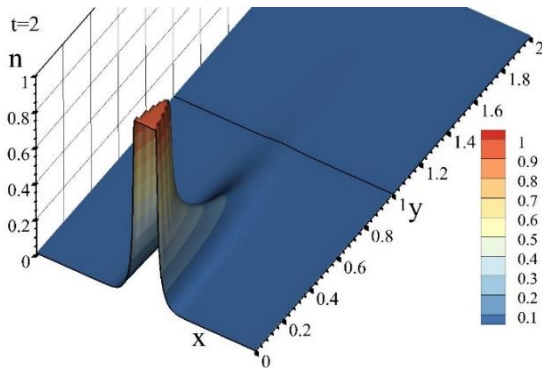
распределение интенсивности оптического импульса вдоль оси y в центре области по поперечной координате $x=0.5$.



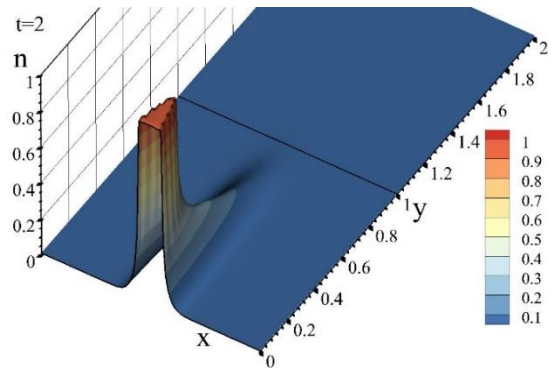
a1



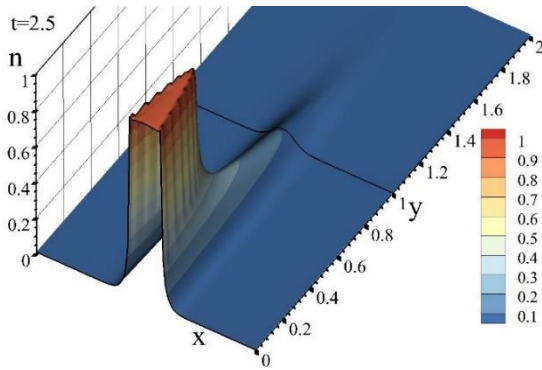
a2



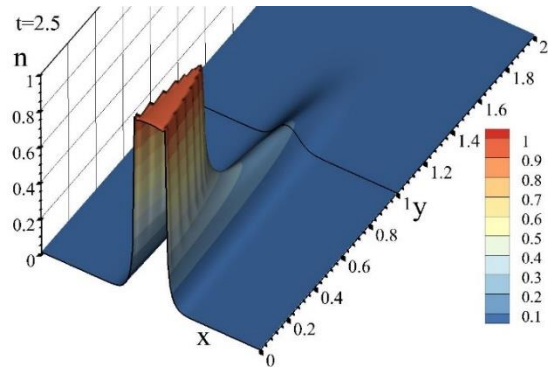
b1



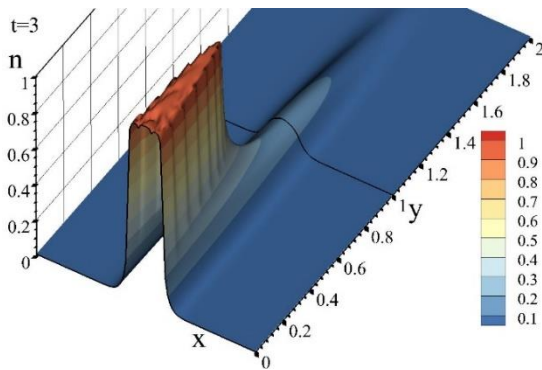
b2



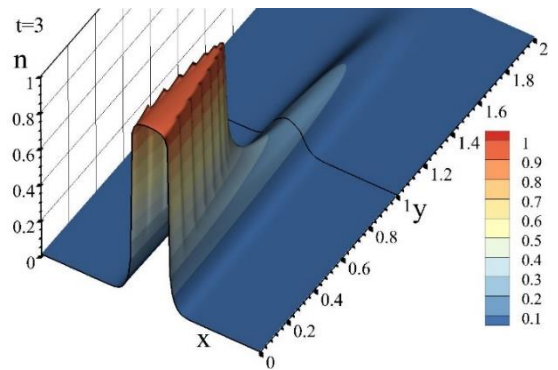
c1



c2



d1



d2

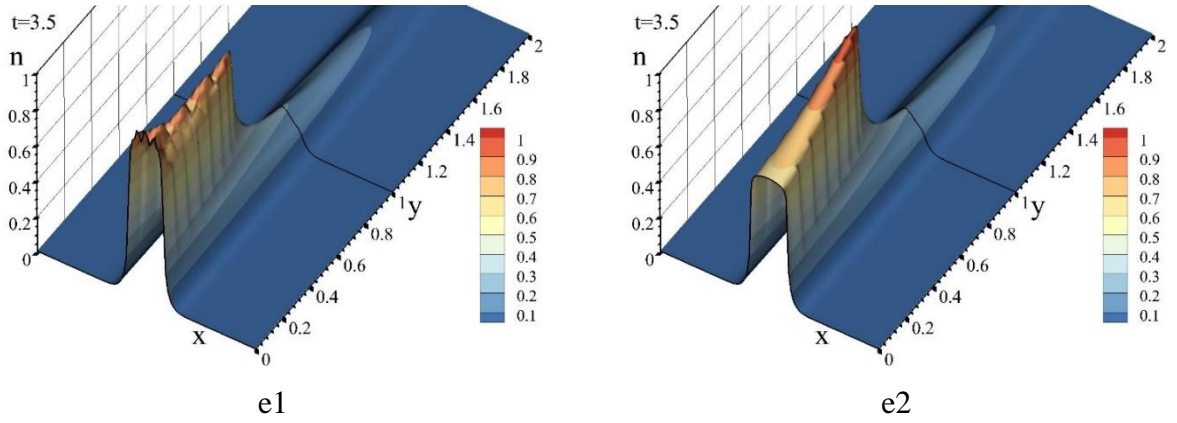
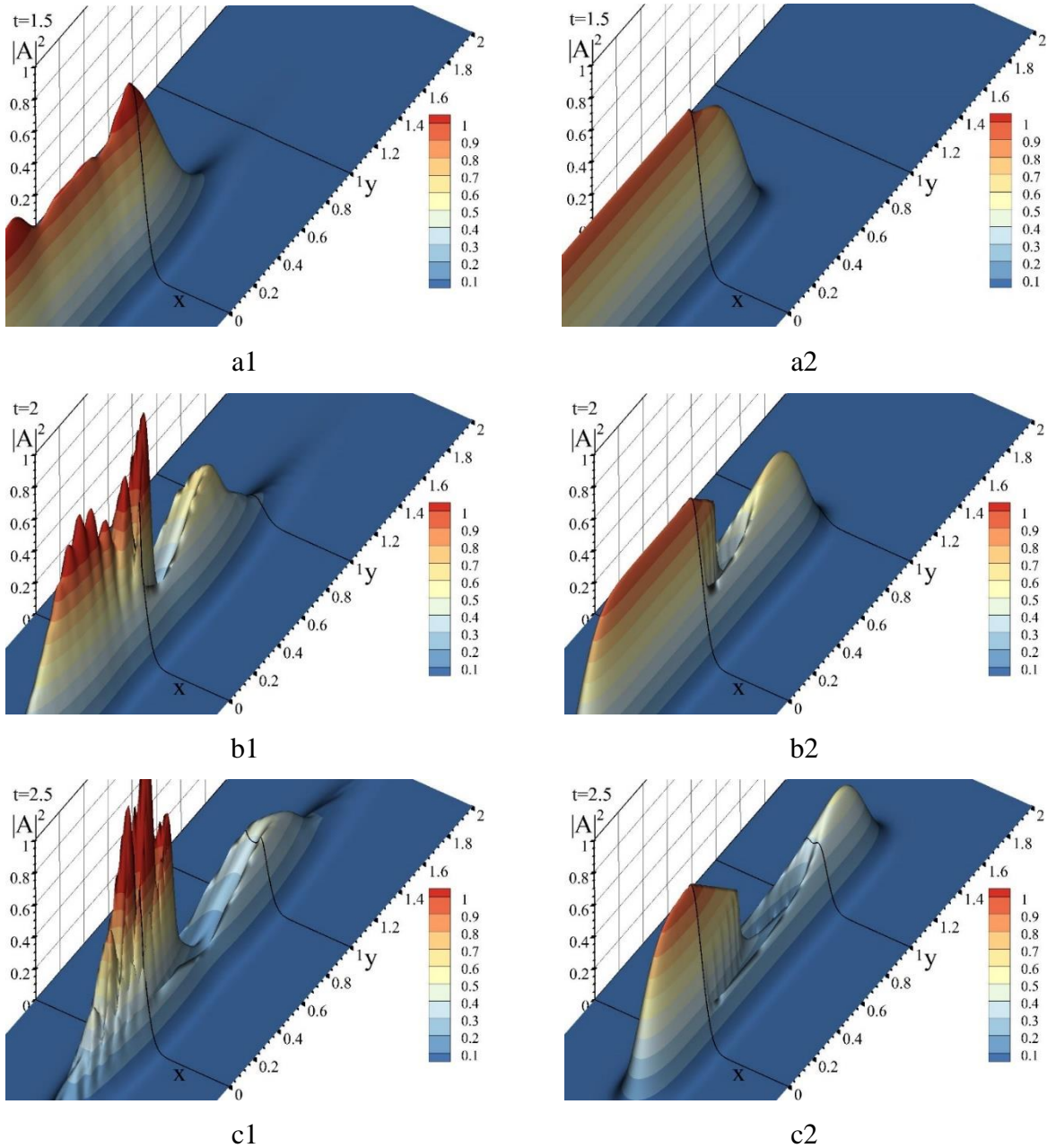


Рис. 4.4.4. Эволюция концентрации свободных электронов n в случае учета продольной дифракции (a1, b1, c1, d1, e1) и без нее (a2, b2, c2, d2, e2). Изображены распределения интенсивности в моменты времени: $t=1.5$ (a1, a2), 2 (b1, b2), 2.5 (c1, c2), 3 (d1, d2), 3.5 (e1, e2).



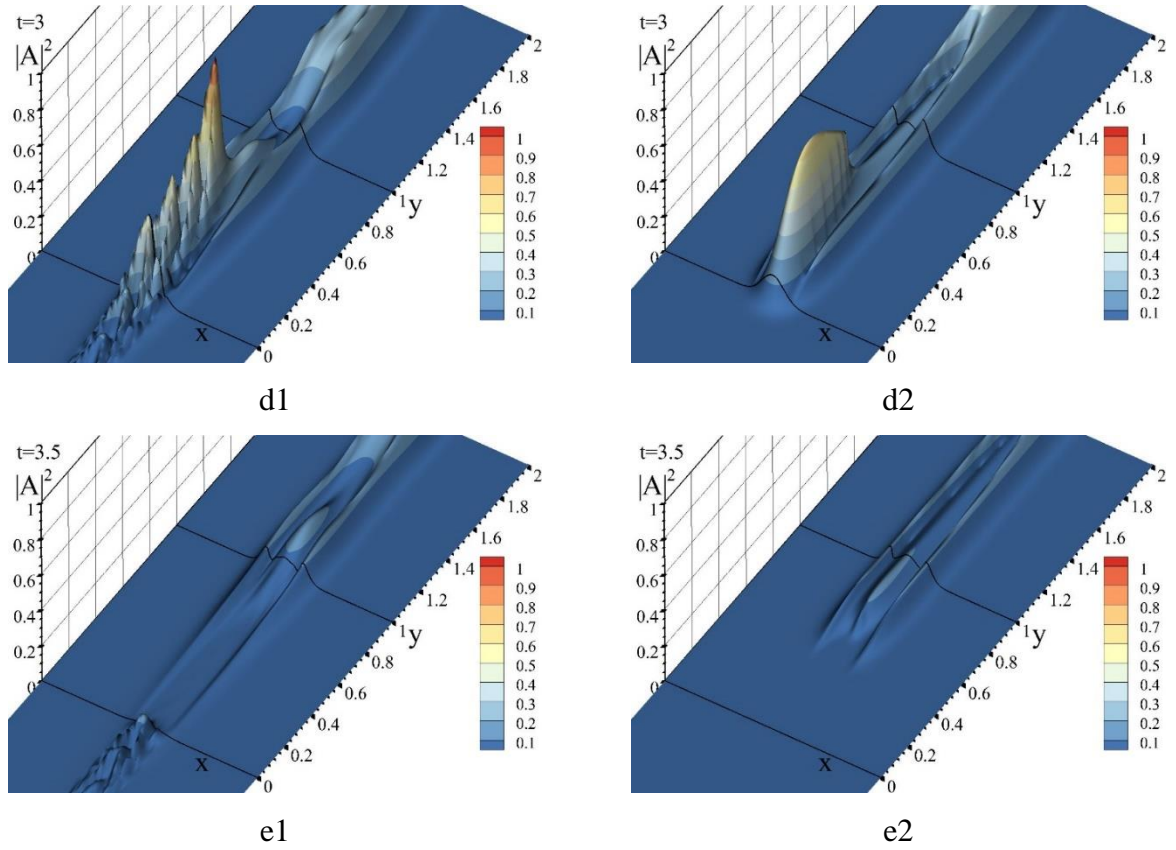
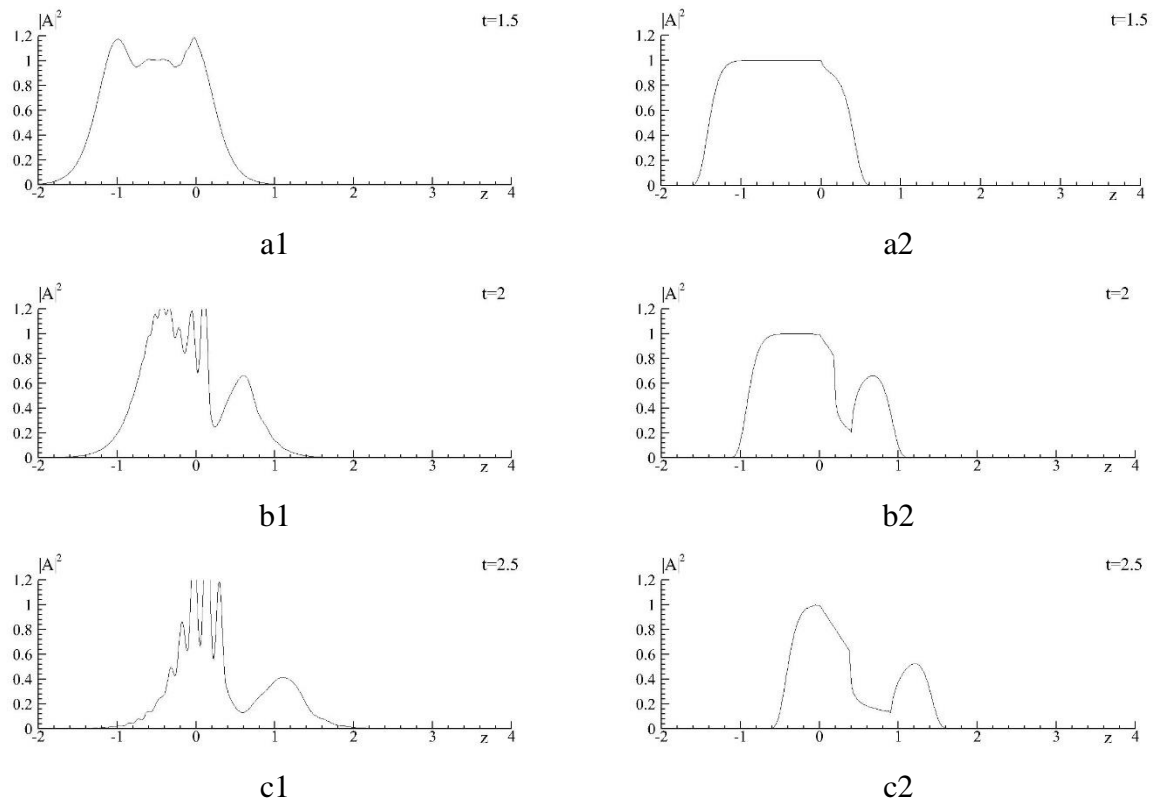


Рис. 4.4.5. Эволюция интенсивности оптического импульса $|A|^2$ в случае учета продольной дифракции (1) и без ее учета (2). Изображены распределения интенсивности в моменты времени: $t=1.5$ (a1, a2), 2 (b1, b2), 2.5 (c1, c2), 3 (d1, d2), 3.5 (e1, e2).



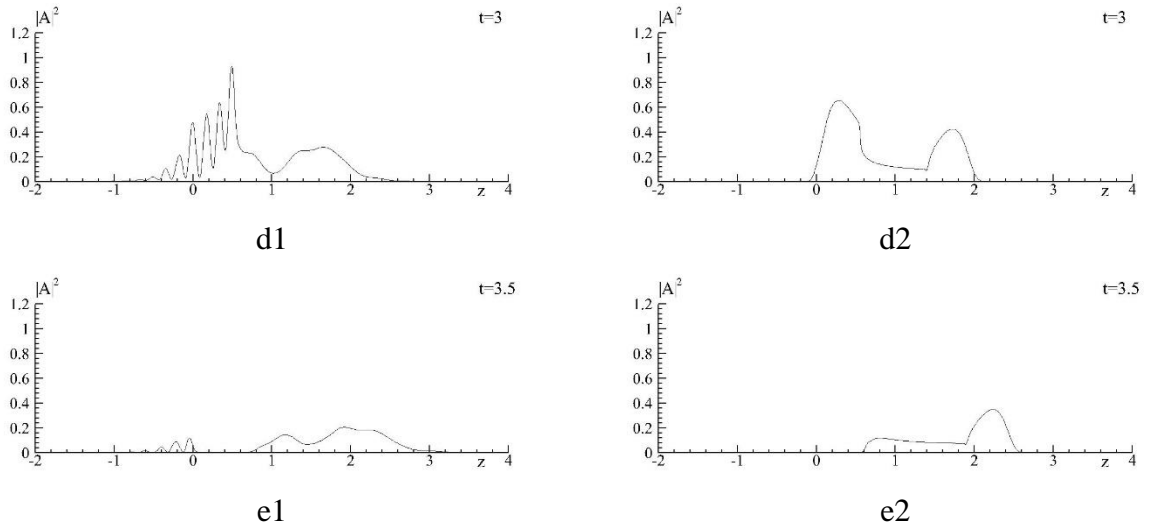
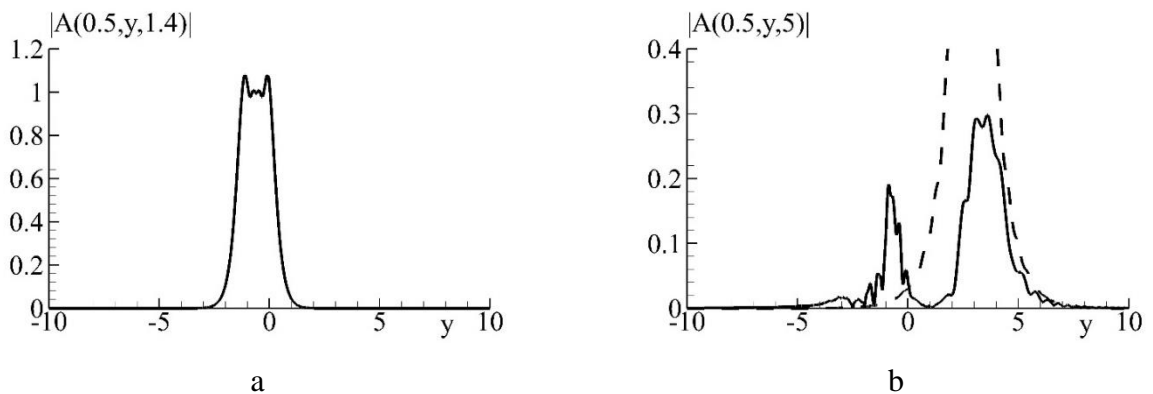


Рис. 4.4.6. Эволюция интенсивности оптического импульса $|A|^2$ вдоль оси z в центре области по поперечной координате $x=0.5$ в случае учета продольной дифракции (1) и без нее (2). Изображены распределения интенсивности в моменты времени: $t=1.5$ (a1, a2), 2 (b1, b2), 2.5 (c1, c2), 3 (d1, d2), 3.5 (e1, e2).

Таким образом при учете продольной дифракции происходит отражение оптического импульса от передней грани полупроводника, на которую он падает. На рис. 4.4.7 изображено распределение модуля амплитуды вдоль оси y в центре оптического пучка ($x=0.5$) в различные моменты времени при моделировании с параметрами (4.4.6) и расположение импульса в случае его распространения в линейной среде (пунктир). Как следует из анализа графиков, на передней грани полупроводника (сечение $y=0$) происходит отражение части оптического импульса (рис. 4.4.7 б). При этом задний фронт отраженной волны остается вблизи поверхности полупроводника, а передний фронт движется в обратном направлении сторону левой границы области (рис. 4.4.7 с). Часть импульса, прошедшая внутрь полупроводника, продолжает распространяться в том же направлении, при этом его скорость значительно превышает скорость распространения импульса в линейной среде (рис. 4.4.7 с). Таким образом, реализуется два феномена: «быстрый свет» и «остановка света» [220-221].



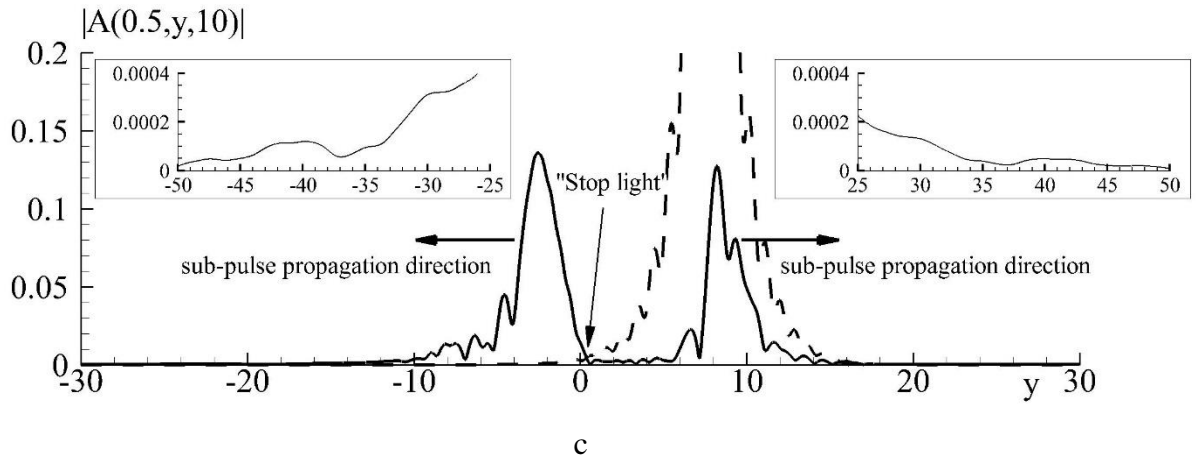


Рис. 4.4.7. Распределение модуля амплитуды оптического пучка вдоль оси y на отрезке $[-60, 60]$ в центре области по поперечной координате $x=0.5$. Изображены распределения интенсивности в моменты времени: $t=4$ (а), 5 (б), 10 (с). Пунктиром обозначено положение импульса в случае его распространения в линейной среде ($\delta = 0$).

§4.5. Краткие выводы

В 4 главе рассмотрен механизм формирования волн переключения в полупроводнике и описан алгоритм построения гистерезисной зависимости концентрации свободных электронов от входной интенсивности пучка в 2D случае. В результате чего была показана возможность одновременной реализации в полупроводнике S - и N -образной зависимости концентрации свободных электронов от входной интенсивности пучка при зависимости коэффициента поглощения от потенциала электрического поля.

Кроме этого, продемонстрировано развитие спиральных волн концентрации свободных электронов в полупроводнике в условиях реализации ОБ при воздействии внешнего электрического поля на полупроводник. Существенное влияние на их формирование оказывают такие параметры, как значения коэффициентов подвижности по осям, направление и сила внешнего электрического поля.

Показано развитие волн переключения в 3D случае модели концентрационной ОБ. В 3D случае, как и в 2D, наблюдается образование периодических структур высокой концентрации заряженных частиц, однако добавление третьей координаты при тех же параметрах приводит изменению их формы и периода.

Так же рассмотрены результаты компьютерного моделирования новой математической модели, учитывающей продольную дифракцию оптического импульса. Показано, что отражение части падающего импульса от лазеро-индуцированных контрастных структур в полупроводнике оказывает существенное влияние на распределение характеристик полупроводника и, следовательно, их необходимо учитывать при моделировании подобных задач.

Заключение

В работе получены следующие основные результаты.

1. Построены оригинальные двухэтапный и трехэтапный итерационные процессы, позволяющие реализовывать консервативные разностные схемы для многомерных задач взаимодействия оптического импульса с полупроводником, описываемых системами нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных. Предложенные итерационные методы обладают рядом важных преимуществ: экономичностью, свойством консервативности (включая консервативность на итерациях) и асимптотической устойчивостью.
2. Продемонстрировано преимущество использования итерационных методов перед прямыми методами при решении задачи Неймана для уравнения Пуассона, включенного в систему нестационарных дифференциальных уравнений и нелинейно связанного с уравнением типа реакция-конвекция-диффузия. Показано, что в случае использования прямых методов нарушается условие разрешимости задачи Неймана.
3. Для вычисления начальных характеристик полупроводника в случае постановки неоднородных граничных условий, на основе метода установления разработан консервативный (в том числе, на итерациях) итерационный метод. Для обеспечения единственности решения задачи Неймана для уравнения Пуассона предложены подходы к нормировке полученных значений потенциала электрического поля.
4. Предложена новая математическая модель взаимодействия оптического импульса с полупроводником, учитывающая продольную дифракцию оптического пучка и продемонстрирован эффект отражения дифрагирующего светового импульса от границы индуцированного им домена высокого поглощения в полупроводнике. Данный результат относится к новому направлению лазерной физики: градиентной нелинейной оптике.
5. Продемонстрировано формирование в полупроводнике, помещенном во внешнее электрическое поле, сложных пространственно-временных структур - спиральных волн концентрации свободных электронов. Построены гистерезисные зависимости характеристик полупроводника от интенсивности падающего импульса, которые подтверждают реализацию оптической бистабильности в системе оптический импульс – полупроводник.

Список литературы

1. Franken P. A., Hill A. E., Peters C. W. [et al.] Generation of optical harmonics // Phys. Rev. Lett – 1961. – Vol. 7(4). – P. 118-120.
2. Li C. Nonlinear optics: Principles and Applications. – Springer, 2016. – 386 p.
3. Agrawal G. P. Optical pulse propagation in doped fiber amplifiers // Physical Review A – 1991. – Vol. 44(11). – P. 7493-7501.
4. Agrawal G. P. Applications of nonlinear fiber optics. – Academic press, 2001. – 458 p.
5. Делоне Н. Б., Крайнов В. П. Нелинейная ионизация атомов лазерным излучением. – М.: Физматлит, 2001. – 312 с.
6. Мосс Т., Баррел Г., Эллис Б. Полупроводниковая оптоэлектроника. Пер. с англ. – М.: Мир, 1976. – 432 с.
7. Крюков П. Г. Лазеры ультракоротких импульсов // Квантовая электроника. – 2001. – Т. 31(2). – С. 95-119.
8. Malomed B. A. Soliton management in periodic systems. – Springer Science & Business Media, 2006. – 180 p.
9. Кившарь Ю. С. Оптические солитоны. – М.: Физматлит, 2005. – 647 с.
10. Карамзин Ю. Н., Сухоруков А. П., Трофимов В. А. Математическое моделирование в нелинейной оптике. – М.: МГУ, 1989. – 156 с.
11. Shen Y. R. Principles of nonlinear optics. – Wiley, 1984. – 563 p.
12. Powers P. E., Haus J. W. Fundamentals of nonlinear optics. – CRC press, 2017. – 500 p.
13. Boyd R. W. Nonlinear optics. – Academic press, 2020. – 609 p.
14. Ахманов С. А., Выслоух В. А., Чиркин А. С. Самовоздействие волновых пакетов в нелинейной среде и генерация фемтосекундных лазерных импульсов // УФН. – 1986. – Т. 149(7). – С. 449-509.
15. Зельдович Б. Я., Пилепецкий Н. Ф., Шкунов В. В. Обращение волнового фронта. – М.: Наука, 1985. – 240 с.

16. Коротеев Н. И., Шумай И.Л. Физика мощного лазерного излучения. – М: Наука, 1991. – 312 с.
17. Бломберген Н. Нелинейная оптика. Пер. с англ. — М.: Мир, 1966. – 424 с.
18. Розанов Н. Н. Оптическая бистабильность и гистерезис в распределенных нелинейных системах. – М.: Наука, 1997. – 336 с.
19. Boyd R. W., Raymer M. G., Narducci L. M. Optical instabilities. – Cambridge University Press, 1986. – 396 p.
20. Gibbs H. M. Optical Bistability: Controlling Light with Light. – Academic Press, 1985. – 484 p.
21. Арсеньев В. В., Днепровский В. С., Клышко Д. Н. Управление длительностью импульса лазера с помощью нелинейного поглощения в полупроводниках // Квантовая электроника. – 1972. – №. 7. – С. 33-37.
22. Днепровский, В. С. Нелинейная фотоника // Успехи физических наук. – 1991. – Т. 161(6). – С. 219-220.
23. Petrus O., Kuhn S., Dinescu G. Simulation of ultrafast switching of infrared radiation by laser-produced semiconductor plasma // Canadian Journal of Physics. – 1986. – Vol. 64(7). – P. 857-864.
24. Hurtado A., Nami M., Henning I. D. [et al.] Bistability patterns and nonlinear switching with very high contrast ratio in a 1550 nm quantum dash semiconductor laser // Applied Physics Letters. – 2012. – Vol. 101(16). – P. 161117.
25. Tripathy S. K., Swain S. Optical bistable switching in semiconductor heterostructure containing a quantum dot layer: The effect of phonons // Optik-International Journal for Light and Electron Optics. – 2013. – Vol. 124(17). – P. 2723-2726.
26. Mazurenko D. A., Kerst R., Dijkhuis J. I. [et al.] Ultrafast optical switching in three-dimensional photonic crystals // Physical review letters. – 2003. – Vol. 91(21). – P. 213903.
27. Wei J., Gan F. Time response of optical switching property of Sb thin films under focused laser pulses // Optical Engineering. – 2003. – Vol. 42(6). – P. 1749-1753.
28. Vlasov Y., Green W. M., Xia F. High-throughput silicon nanophotonic wavelength-insensitive switch for on-chip optical networks // Nature photonics. – 2008. – Vol. 2(4). – P. 242-246.
29. Gibbs, H. M., McCall, S. L., Venkatesan, T. N. C. [et al.] Optical bistability in semiconductors // Appl. Physics Letters. – 1979. – Vol. 35(6). – P. 451-453.

30. Gibbs, H. M., McCall, S. L., Venkatesan, T. N. C. Optical bistable devices: the basic components of all-optical systems? // *Optical Engineering*. – 1980. – Vol. 19(4). – P. 463-468.
31. Smith P. W., Hermann J. P., Tomlinson W. J., [et al.], Optical bistability at a non-linear interface // *Appl. Phys. Lett.* – 1979. – Vol. 35. – P. 846-848.
32. Agrawal G. P., Carmichael H. J. Optical bistability through nonlinear dispersion and absorption // *Physical Review A*. – 1979. – Vol. 19(5). – P. 2074.
33. Smith S. D. Optical bistability, photonic logic, and optical computation // *Applied optics*. – 1986. – Vol. 25(10). – P. 1550-1564
34. Abraham E., Smith S. D. Optical bistability and related devices // *Reports on Progress in Physics*. – 1982. – Vol. 45(8). – P. 815.
35. Бакиев А. М., Вандышев Ю. В., Днепровский В. С. [и др.] Быстродействующий полупроводниковый бистабильный элемент // *Квантовая электроника*. – 1985. – Т. 12(3). – С. 652-655.
36. Глотова М. Ю., Зуев М. А., Шварцбург А. Б. Гистерезисные эффекты при отражении волн от поглощающих сред // *Квантовая электроника*. – 1992. – Т. 19(8). – С. 788-789.
37. Chiangga R. S., Pitakwongsaporn S., Frank T. D. [et al.] Optical bistability investigation in a nonlinear silicon microring circuit // *Journal of Lightwave Technol.* – 2013. – Vol. 31(7). – P. 1101-1105.
38. Kwan P. K., Lu Y. Y. Computing optical bistability in one-dimensional nonlinear structures // *Optics Commun.* – 2004. – Vol. 238(1-3). – P. 169-175.
39. Weaire D. Kermode J. P. Dispersive optical bistability: numerical methods and definitive results // *JOSA B*. – 1986. – Vol. 3(12). – P. 1706-1711.
40. Ghadi A., Mirzanejhad S. Two-Photon Absorption effect on semiconductor microring resonators // *Optik*. – 2015. – Vol. 126(18). – P. 1645-1649.
41. Li L. Optical bistability in semiconductor lasers under intermodal light injection // *IEEE journal of quantum electronics*. – 1996. – Vol. 32(2). – P. 248-256.
42. Nasehi R. Ultra-low threshold optical bistability and multi-stability in dielectric slab doped with semiconductor quantum well // *Commun. Theor. Phys*. – 2016. Vol. 66(1). – P. 129-132.
43. Wang H. U. I., Zhang H. T., Wang Z. P. Optical Bistability via Incoherent Pumping Fields in Semiconductor Quantum Wells // *Modern Physics Letters B*. – 2011. – Vol. 25(02). – P. 97-108.

44. Baas A., Karr J. P., Eleuch H. [et al.] Optical bistability in semiconductor microcavities // *Physical Review A*. – 2004. – Vol. 69(2). – P. 023809.
45. Joshi A., Xiao M. Optical bistability in a three-level semiconductor quantum-well system // *Applied Physics B*. – 2004. – Vol. 79(1). – P. 6569.
46. Zenkova K. Y., Kramar V. M., Kramar N. K. [et al.] Optical bistability of a layered semiconductor in the exciton absorption region // *Optics and Spectroscopy*. – 2006. – Vol. 101(5). – P. 731-735.
47. Raheli A., Hamed H. R., Sahrai M. Controllable optical bistability and multistability in a graphene structure under external magnetic field // *Laser Phys*. – 2016. – Vol. 26(2). – P. 025201.
48. Li J. B., Kim N. C., Cheng M. T. [et al.] Optical bistability and nonlinearity of coherently coupled exciton-plasmon systems // *Optics Express*. – 2012. – Vol. 20(2). – P. 1856-1861.
49. Gibbs H. M., Olbright G. R., Peyghambarian N. [et al.] Kinks: Longitudinal excitation discontinuities in increasing-absorption optical bistability // *Physical Review A*. – 1985. – Vol. 32(1). – P. 692-694.
50. Koch S. W., Schmidt H. E., Haug H. Optical bistability due to induced absorption: Propagation dynamics of excitation profiles // *Applied physics letters*. – 1984. – Vol. 45(9). – P. 932-934.
51. Lindberg M., Koch S. W., Hang H. Structures, formation, and motion of kinks in increasing g-absorption optical bistability // *Physical Review A*. – 1986. – Vol. 33(1). – P. 407-415.
52. Калиниченко М. И., Трофимов В. А. О нелинейном распространении оптического излучения в химически активной среде // *Оптика и спектроскопия*. – 1986. – Т. 61(1). – С. 182-184.
53. Bortolozzo U., Pastur L., Ramazza P. L. Bistability between Different Localized Structures in Nonlinear Optics // *Physical review letters*. – 2004. – Vol. 93(25). – P. 253901.
54. Hamed H. R., Asadpour S. H. Realization of optical bistability and multistability in Landau quantized graphene // *Journal of Applied Physics*. – 2015. – Vol. 117(18). – P. 183101.
55. Nakarmi B., Hoai T. Q., Won Y. H. [et al.] Analysis of hysteresis width on optical bistability for the realization of optical SR flip-flop using SMFP-LDs with simultaneous inverted and non-inverted outputs // *IEEE Photonics J*. – 2014. – Vol. 6(3). – P. 6600512.
56. Kaplan A. E. Optical multi-hysteresises and quasi-solitons in nonlinear plasma // *Optics express*. – 2013. – Vol. 21(11). – P. 13134-13144.
57. Смит Р. Полупроводники. – М: Мир, 1982, – 560 с.

58. Azadpour F., Bahari A. All-optical bistability based on cavity resonances in nonlinear photonic crystal slab-reflector-based Fabry–Perot cavity // *Optics Communications*. – 2019. – Vol. 437. – P. 297-302.
59. Ba N., Fei J. Y., Li D. F. [et al.]. Efficient manipulation of a probe pulse for achieving optical storage and switch in triple coupled quantum dots // *Applied Optics*. – 2020. – Vol. 59(18). – P. 5415-5421.
60. Dong H. M., Nga L. T. Y., Bang N. H. Optical switching and bistability in a degenerated two-level atomic medium under an external magnetic field // *Applied Optics*. – 2019. – Vol. 58(16). – P. 4192-4199.
61. Doost H. A., Ara M. H. M., Ghasedi A. [et al.] Effects of Gold and Silver Nanoparticles on Optical Bistability of Titanium Dioxide Nanocolloid // *Physics of the Solid State*. – 2021. – Vol. 63(2). – P. 318-323.
62. Hamed H. R., Paspalakis E., Yannopapas V. Effective Control of the Optical Bistability of a Three-Level Quantum Emitter near a Nanostructured Plasmonic Metasurface // *Photonics*. – Multidisciplinary Digital Publishing Institute, 2021. – Vol. 8(7). – P. 285.
63. Kim M., Kim S., Kim S. Resonator-free optical bistability based on epsilon-near-zero mode // *Scientific Reports*. – 2019. – Vol. 9(1). – P. 1-5.
64. Moshiri S. M. M., Khodadadi M., Nozhat N. Theoretical analysis of ultra-fast multi-wavelength switch containing Kerr nonlinear material and its application as simultaneous AND and NOR logic gates // *Applied Optics*. – 2020. – Vol. 59(20). – P. 6030-6040.
65. Mukherjee K., Jana P. C. Controlled optical bistability in parity-time-symmetric coupled microcavities: Possibility of all-optical switching // *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*. – 2020. – Vol. 117. – P. 113780.
66. Nandi R., Goswami A., Das B. K. Phase controlled bistability in silicon microring resonators for nonlinear photonics // *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*. – 2020. – Vol. 27(2). – P. 1-9.
67. Naseri T., Balaei M., Kakavand Y. Convenient dual optical bistability in a cavity-free structure based on nonlinear graphene-plasmonic nanoparticle composite thin layers // *OSA Continuum*. – 2019. – Vol. 2(8). – P. 2401-2412.
68. Rao S. S., Wan B. F., Zhang H. F. Optical Bistability of 1-D Photonic Crystals Containing of Nonlinear Plasma // *IEEE Transactions on Plasma Science*. – 2021. – Vol. 49(9). – P. 2653-2660.

69. Solookinejad G., Jabbari M., Nafar M. [et al.] Theoretical investigation of optical Bistability and multistability via spontaneously generated coherence in four-level Rydberg atoms // *International Journal of Theoretical Physics*. – 2019. – Vol. 58(5). – P. 1359-1368.
70. Wu Y. M., Chen G. Q., Wu W. C. [et al.] Optical bistability in two-dimensional nonlinear composites of coated cylinders with nonlinear core and graded shell // *EPJ Applied Metamaterials*. – 2020. – Vol. 7. – P. 6.
71. Xu H. Optical bistability and multistability via both coherent and incoherent fields in a three-level system // *Laser Physics*. – 2018. – Vol. 29(1). – P. 015205.
72. Yousefi E., Hatami M. A numerical method for pulse propagation in nonlinear fiber Bragg grating with ternary stability nature // *Optical Fiber Technology*. – 2020. – Vol. 54. – P. 102075.
73. Yu C., Sun L., Zhang H. [et al.] Controllable optical bistability by tunneling effect and coupling laser field in quantum dot molecules // *Optik*. – 2019. – Vol. 184. – P. 128-133.
74. Zhao X., Xu B., Kong X. [et al.] Tunable optical bistability, tristability and multistability in arrays of graphene // *Applied Sciences*. – 2020. – Vol. 10(17). – P. 5766.
75. Trofimov V. A., Loginova M. M. Computer modeling of field optical bistability // *Proceedings of CMMSE'04*. – Uppsala, Sweden. 2004. – P. 266-273.
76. Логинова М. М, Трофимов В. А. О возможности осцилляций поперечного размера домена высокой концентрации свободных электронов при воздействии короткого светового импульса на полупроводник // *ЖТФ*. – 2004. – Т.74(11). – С. 123-126.
77. Trofimov V.A., Loginova M. M. About the Possibility of Field Optical Bistability // *Proceedings of Pacific Rim Conference on Lasers & Electro-Optics*. – 2005.– P. 883-884.
78. Логинова М. М, Трофимов В. А. Осцилляции концентрации свободных электронов при воздействии фемтосекундного светового импульса на полупроводник // *Оптика и спектроскопия*. – 2005. – Т. 98(6). – С. 1001-1007.
79. Trofimov V. A., Loginova M. M. Anomalous influence of electrons diffusion on absorption optical bistability realization // In "Nonlinear Optics Applications"/ Ed. Karpierz M.M., Boardman A.D., Stegeman G.I. *Proceedings of SPIE*. – 2005. – Vol. 5949. – P. 59490H.
80. Логинова М. М, Трофимов В. А. О возможности оптической бистабильности на основе зависимости коэффициента поглощения полупроводника от индуцированного электрического поля // *ЖТФ*. – 2006. – Т. 76(5). – С. 82-87.

81. Варенцова С. А., Трофимов В. А. Влияние сильного светового поля на сдвиг спектра водородоподобного атома // Численные методы в математической физике. Сборник трудов факультета ВМиК МГУ / Под ред. Д.П. Костомарова, В.И. Дмитриева. – М.: Изд-во факультета ВМиК МГУ, 1998. – С. 67-75.
82. Варенцова С. А., Логинова М. М., Трофимов В. А. Математическое моделирование оптической бистабильности на основе светоиндуцированного электрического поля // Вестник МГУ. Сер.15. Вычислительная математика и кибернетика. – 2003. – №1. – С. 20-27.
83. Trofimov V. A., Zakharova I. G. On the role of dispersion of the nonlinear response of a medium in the formation of high-absorption domain in cavity-free optical bistable systems // Bulletin of the Russian Academy of Sciences-Physics. – 1996. – Vol. 60(4). – P. 209-217.
84. Гуназе О. А., Трофимов В. А. Дифракционные многодоменные лазеро-индуцированные структуры в химически активной газовой смеси // Письма в Журнал технической физики. – 1996. – Т. 22(16). – С. 1-6.
85. Гуназе О. А., Трофимов В. А. О формировании "обратного" кинка в оптически бистабильных системах на основе возрастающего поглощения // Письма в Журнал технической физики. – 1997. – Т. 23(21). – С. 69-73.
86. Гуназе О. А., Трофимов В. А. Лазероиндуцированные пространственные структуры в газофазной химически активной среде при воздействии дифрагирующих трубчатых пучков // Журнал технической физики. – 1998. – Т. 68(3). – С. 8-14.
87. Гуназе О. А., Трофимов В. А. Об эффективности стимулирования химической газовой реакции дифрагирующим световым пучком при поглощении его энергии на колебательных переходах // Журнал технической физики. – 1999. – Т. 69(4). – С. 65-73.
88. Выслоух А. В., Трофимов В. А. Формирование продольных многодоменных структур в оптически бистабильной системе под воздействием коллимированного трубчатого пучка // Письма в Журнал технической физики. – 2000. – Т. 26(22). – С. 44-49.
89. Milukova O. Yu., Trofimov V. A., Zakharova I. G. Mathematical modeling of diffraction instability of laser beam in optical bistable system // Computer Physics Communications. – 2000. – Vol. 126(1-2). – P. 126-130.
90. Выслоух А. В., Трофимов В. А. О формировании нескольких продольных кинков высокого поглощения при воздействии коллимированных гауссовых световых пучков // Письма в Журнал технической физики. – 2000. – Т. 26(3). – С. 60-66.

91. Выслоух А. В., Трофимов В. А. Формирование движущихся кинков при воздействии коллимированных трубчатых световых пучков. // Оптика и спектроскопия – 2000. – Т. 89(5). – С. 802-805.
92. Трофимов В. А., Трощев Ю. В. О роли эллиптичности пучка при формировании доменов высокого поглощения в многослойных системах // Оптика и спектроскопия. – 2002. – Т. 92(2). – С. 315–319.
93. Trofimov V. A. Effect of false writing of information in optical processor and optical storage devices realizing on the base of nonlinear absorption // Proceeding of SPIE. – 2002. – Vol. 4750. – P. 227-237.
94. Vysloukh A. V., Trofimov V. A. An Additional Moving Domain Induced by a High Absorption Domain under the Action of Collimated Light Beams // Optics and Spectroscopy. – 2002. – Vol. 93(1). – P. 88-90.
95. Трофимов В. А., Трощев Ю. В. Многодоменные динамические структуры высокого поглощения в слоистой и непрерывной химически активной среде, формируемые под воздействием эллиптических световых пучков // Оптика и спектроскопия. – 2002. – Т. 93(3). – С. 465–472.
96. Выслоух А. В., Трофимов В. А. Дифракционные продольные многодоменные структуры в слоистой нелинейно поглощающей среде // Оптика и спектроскопия. – 2003. – Т. 95(1). – С. 126-130.
97. Борн М., Вольф Э. Основы оптики: Пер. с англ. – М: Наука, 1973. – 719 с.
98. Шварцбург А. Б. Оптика нестационарных сред // Успехи физических наук. – 2005. – Т. 175(8). – С. 833-861.
99. Shvartsburg A. B., Maradudin A. A. Waves in Gradient Metamaterials. – World Scientific, 2013. – 340 с.
100. Ерохин Н. С., Зуева Ю. М., Шварцбург А. Б. Поляризационные эффекты в градиентной нанооптике // Квантовая электроника. – 2013. – Т. 43(9). – С. 785-790.
101. Шварцбург А. Б., Ерохин Н. С. Резонансное туннелирование сверхкоротких электромагнитных импульсов в градиентных метаматериалах: парадоксы и перспективы // Успехи физических наук. – 2011. – Т. 181(11). – С. 1212-1217.
102. Шварцбург А. Б., Ерохин Н. С. Градиентные акустические барьеры (точно решаемые модели) // Успехи физических наук. – 2011. – Т. 181(6). – С. 627-646.
103. Бонч-Бруевич В. Л., Калашников С. Г. Физика полупроводников. – М.: Наука, 1990, – 685 с.

104. Trofimov V. A. New approach to numerical simulation of femtosecond pulse propagation in photonic crystal // Proceedings of SPIE. – 2000. – Vol. 4002. – P. 28-33.
105. Терёшин Е. Б., Трофимов В. А., Федотов М. В. Консервативная разностная схема для задачи двухволнового взаимодействия фемтосекундных импульсов в фотонном кристалле // ЖВМ и МФ – 2003. – Т. 43(10). – С. 1530-1535.
106. Самарский А. А. Теория разностных схем. – М.: Наука, 1989. – 656 с.
107. Ладыженская О. А. Метод конечных разностей в теории уравнений с частными производными // Успехи математических наук. – 1957. – Т. 12:5(77). – С. 123-148.
108. Самарский А. А., Николаев Е. С. Методы решения сеточных уравнений. – М: Наука, 1978. – 592 с.
109. Самарский А. А., Андреев В. Б. Разностные методы для эллиптических уравнений. – М.: Наука, 1976. – 352 с.
110. Годунов С. К., Рябенький В. С. Разностные схемы: введение в теорию: Учебное пособие. – М.: Наука, 1977. – 440 с.
111. Марчук Г. И. Методы вычислительной математики. – М.: Наука, 1980. – 536 с.
112. Mitchell A. R., Griffiths D. F. The finite difference method in partial differential equations. – Wiley, 1980. – 284 p.
113. Smith G. D. Numerical solution of partial differential equations: Finite difference method. –Oxford: Clarendon press, 1986. – 350 с.
114. Thomas J. W. Numerical partial differential equations: Finite difference methods. – Springer, 1995. – 437 с.
115. Loustau J. Numerical Differential Equations: theory and technique, ODE methods, finite differences, finite elements and collocation. – World Scientific, 2016. – 384 с.
116. Bloembergen N. Conservation laws in nonlinear optics // JOSA. – 1980. – Vol. 70(12). – P. 1429-1436.
117. Peaceman D. W., Rachford H. H. The numerical solution of parabolic and elliptic differential equations // Journal of the Society for industrial and Applied Mathematics. – 1955. – Vol. 3(1). – P. 28-41.
118. Douglas Jr J. On the numerical integration of $\partial^2 u / \partial x^2 + \partial^2 u / \partial y^2 = \partial u / \partial t$ by implicit methods // Journal of the society for industrial and applied mathematics. – 1955. – Vol. 3. (1). – P. 42-65.

119. Douglas J., Rachford H. H. On the numerical solution of heat conduction problems in two and three space variables // Transactions of the American mathematical Society. – 1956. – Vol. 82(2). – P. 421-439.
120. Douglas J. Alternating direction methods for three space variables // Numerische Mathematik. – 1962. – Vol. 4(1). – P. 41-63.
121. Яненко Н. Н. Метод дробных шагов решения многомерных задач математической физики. – Новосибирск: Наука, Сибирское отделение, 1967. – 197с.
122. Марчук Г. И. Методы расщепления. – М.: Наука, 1988. – 264с.
123. Lees M. Alternating direction and semi-explicit difference methods for parabolic partial differential equations // Numerische Mathematik. – 1961. – Vol. 3(1). – P. 398-412.
124. Birkhoff G., Varga R., Young D. Alternating direction implicit methods // Advances in computers. – Acad, press, 1962. – P. 189-273.
125. Douglas J., Gunn, J. E. A general formulation of alternating direction methods // Numerische Mathematik. – 1964. – Vol. 6(1). – P. 428–453.
126. Wachspress E. L., Habetler G. J., An alternating-direction-implicit iteration technique // Journal of the Society for Industrial and Applied Mathematics. – 1960. Vol. 8(2). – P. 403-423.
127. Wachspress E. L. Optimum alternating-direction-implicit iteration parameters for a model problem // Journal of the Society for Industrial and Applied Mathematics. – 1962. – Vol. 10(2). – P. 339-350.
128. Гулин А. В. Необходимые и достаточные условия устойчивости трехслойных разностных схем // ЖВМ и МФ – 1968. – Т. 8(4). – С. 899-902.
129. Годунов С. К., Забродин А. В. О разностных схемах второго порядка точности для многомерных задач // ЖВМ и МФ – 1962. – Т. 2(4). – С. 706-708.
130. Самарский А. А. Об одном экономичном разностном методе решения многомерного параболического уравнения в произвольной области // ЖВМ и МФ – 1962. – Т. 2(5). – С. 787-811.
131. Самарский А. А. О сходимости метода дробных шагов для уравнения теплопроводности // ЖВМ и МФ – 1962. – Т. 2(6). – С. 1117-1121.
132. Самарский А. А., Вабищевич П. Н. Итерационные методы многокомпонентного расщепления // Доклады РАН. – 1997. – Т. 354(3). – С. 310-312.
133. Ильин В. П. О расщеплении разностных уравнений параболического и эллиптического типов // Сибирский математический журнал. – 1965. – Т. 6(6). – С. 1425-1428.

134. Самарский А. А. О принципе аддитивности для построения экономических разностных схем // Докл. АН СССР. – 1965. – Т. 165(6). – С. 1253-1256.
135. Самарский А. А., Вабищевич П. Н. Аддитивные схемы для задач математической физики. – М.: Наука 2001. – 319с.
136. Гордезиани Д. Г., Меладзе Г. В. О моделировании третьей краевой задачи для многомерных параболических уравнений в произвольной области одномерными уравнениями // ЖВМ и МФ – 1974. – Т. 14(1) – С. 246-250.
137. Яненко Н. Н. Об экономических неявных схемах (метод дробных шагов) // Доклады Ака. Наук СССР. – 1960. – Т. 134(4). – С. 1034–1036.
138. Jovanovic B. On the convergence of a multicomponent alternating direction difference scheme // Publ. de L'Inst. Math. – 1994. – Vol. 56(70) – P. 129-134.
139. Zhang Y., Sun Z. Alternating direction implicit schemes for the two-dimensional fractional sub-diffusion equation // Journal of Computational Physics. – 2011. – Vol. 230(24). – P. 8713-8728.
140. Dai W., Nassar R. Compact ADI method for solving parabolic differential equations // Numerical Methods for Partial Differential Equations: An International Journal. – 2002. – Vol. 18(2). – P. 129-142.
141. In't Hout K. J., Welfert B. D. Stability of ADI schemes applied to convection–diffusion equations with mixed derivative terms // Applied numerical mathematics. – 2007. – Vol. 57(1). – P. 19-35.
142. Li J., Chen Y., Liu G. High-order compact ADI methods for parabolic equations // Computers & Mathematics with Applications. – 2006. – Vol. 52(8-9). – P. 1343-1356.
143. Angot P., Keating J., Minev P. D. A direction splitting algorithm for incompressible flow in complex geometries // Computer methods in applied mechanics and engineering. – 2012. – Vol. 217. – P. 111-120.
144. Belhamadia Y., Rammal Z. Efficiency of semi-implicit alternating direction implicit methods for solving cardiac monodomain model // Computers in Biology and Medicine. – 2021. – Vol. 130. – P. 104187.
145. Rakhuba M. Robust Alternating Direction Implicit Solver in Quantized Tensor Formats for a Three-Dimensional Elliptic PDE // SIAM Journal on Scientific Computing. – 2021. – Vol. 43(2). – P. A800-A827.
146. Pourghanbar, S., Manafian, J., Ranjbar, M. [et al.] An Efficient Alternating Direction Explicit Method for Solving a Nonlinear Partial Differential Equation // Mathematical Problems in Engineering. – 2020, – Article ID 9647416.

147. Chiarini A., Quadrio M., Auteri F. A direction-splitting Navier–Stokes solver on co-located grids // *Journal of Computational Physics*. – 2021. – Vol. 429. – P. 110023.
148. Chen H., Wang Y. Modified Douglas splitting method for differential matrix equations // *Journal of Computational and Applied Mathematics*. – 2021. – Vol. 384. – P. 113162.
149. Strang G. On the construction and comparison of difference schemes // *SIAM journal on numerical analysis*. – 1968. – Vol. 5(3) – P. 506-517.
150. Weideman J. A. C., Herbst B. M. Split-step methods for the solution of the nonlinear Schrödinger equation // *SIAM Journal on Numerical Analysis*. – 1986. – Vol. 23(3) – P. 485–507.
151. Toroker Z., Horowitz M. Optimized split-step method for modeling nonlinear pulse propagation in fiber Bragg gratings // *JOSA B*. – 2008. – Vol. 25(3). – P. 448-457.
152. Dehghan M. Taleei A. A compact split-step finite difference method for solving the nonlinear Schrödinger equations with constant and variable coefficients // *Computer Physics Communications*. – 2010. – Vol. 181(1). – P. 43-51.
153. Oanh N. T. N. A splitting method for a backward parabolic equation with time-dependent coefficients // *Computers and Mathematics with Applications*. – 2013. – Vol. 65(1). – P. 17-28.
154. Lakoba T. I. Instability of the finite-difference split-step method applied to the generalized nonlinear Schrödinger equation. III. external potential and oscillating pulse solutions // *Numerical Methods for Partial Differential Equations*. – 2017. – Vol. 33(3). –P. 633-650.
155. Wang H., Ma X., Lu J. [et al.] An efficient time-splitting compact finite difference method for Gross–Pitaevskii equation // *Applied Mathematics and Computation*. – 2017. – Vol. 297. – P. 131-144.
156. Fleck J. A., Morris J. R., Feit M. D. Time-dependent propagation of high energy laser beams through the atmosphere // *Applied Physics*. – 1976. – Vol. 10(2). – P. 129-160.
157. Trofimov V. A., Peskov N. V. Comparison of Finite-Difference Schemes for the Gross-Pitaevskii Equation // *Mathematical Modelling and Analysis*. – 2009. – Vol. 14(1). – P. 109–126.
158. Матусевич О. В., Трофимов В. А. Численный метод нахождения 3D-солитонов нелинейного уравнения Шрёдингера в аксиально-симметричном случае // *ЖВМ и МФ* – 2009. – Т. 49(11). – С. 1988-2000.
159. Варенцова С. А., Волков А. Г., Трофимов В. А. Консервативная разностная схема для задачи распространения фемтосекундного лазерного импульса в кубично-нелинейной среде // *ЖВМ и МФ* – 2003. –Т. 43(11). – С. 1709-1721.

160. Волков А. Г., Трофимов В. А., Терёшин Е. Б. Консервативные разностные схемы для некоторых задач фемтосекундной нелинейной оптики // Дифференциальные уравнения. – 2005. – Т. 41(7). – С. 908-917.
161. Trofimov V. A., Rozantsev A. V. 2D soliton formation of BEC at its interaction with external potential // Proceedings of SPIE. – 2012. – Vol. 8497. – P. 84970F.
162. Taleei A., Dehghan M. Time-splitting pseudo-spectral domain decomposition method for the soliton solutions of the one- and multi-dimensional nonlinear Schrödinger equations // Computer Physics Communications. – 2014. – Vol. 185(6). – P. 1515-1528.
163. Wang H. Numerical studies on the split-step finite difference method for nonlinear Schrödinger equations // Applied Mathematics and Computation. – 2005. – Vol. 170(1). – P. 17-35.
164. Barletti L., Brugnano L., Caccia G. F. [et al.] Energy-conserving methods for the nonlinear Schrödinger equation // Applied Mathematics and Computation. – 2018. – Vol. 318. – P. 3-18.
165. Taha T. R. A numerical scheme for the nonlinear Schrödinger-equation // Computers & Mathematics with Applications. – 1991. – Vol. 22(9). – P. 77-84.
166. Herbst B. M., Morris J. L., Mitchell A. R. Numerical experience with the nonlinear Schrödinger-equation // Journal of Computational Physics. – 1985. – Vol. 60(2). – P. 282-305.
167. Gammal A., Frederico T., Tomio L. Improved numerical approach for the time-independent Gross-Pitaevskii nonlinear Schrödinger equation // Physical Review E. – 1999. – Vol. 60(2). – P. 2421-2424.
168. Simos T. E., Williams P. S. A finite-difference method for the numerical solution of the Schrödinger equation // Journal of Computational and Applied Mathematics. – 1997. – Vol. 79(2). – P. 189-205.
169. Han H. D., Yin D. S., Huang Z. Y. Numerical solutions of Schrödinger equations in R^3 // Numerical Methods for Partial Differential Equations. – 2007. – Vol. 23(3). – P. 511-533.
170. Amiranashvili S., Ciegis R., Radziunas M. Numerical methods for a class of generalized nonlinear Schrödinger equations // Kinetic and Related Models. – 2015. – Vol. 8(2). – P. 215-234.
171. Gauckler L. Numerical long-time energy conservation for the nonlinear Schrödinger equation // IMA Journal of Numerical Analysis. – 2017. – Vol. 37(4). – P. 2067-2090.
172. Cao L. Q., Luo J. L., Wang C. Y. Multiscale analysis and numerical algorithm for the Schrödinger equations in heterogeneous media // Applied Mathematics and Computation. – 2010. – Vol. 217(8). – P. 3955-3973.

173. Hong J. L., Liu Y. A novel numerical approach to simulating nonlinear Schrödinger equations with varying coefficients // *Applied Mathematics Letters*. – 2003. – Vol. 16(5). – P. 759-765.
174. van Dijk W., Brown J., Spyksma K. Efficiency and accuracy of numerical solutions to the time-dependent Schrödinger equation // *Physical Review E*. – 2011. – Vol. 84(5). – P. 056703.
175. Kevrekidis P. G. The discrete nonlinear Schrödinger equation: mathematical analysis, numerical computations and physical perspectives. – Springer Science & Business Media, 2009. – 436 c.
176. Li X., Zhang L. M., Zhang T. A new numerical scheme for the nonlinear Schrödinger equation with wave operator // *Journal of Applied Mathematics and Computing*. – 2017. – Vol. 54(1). – P. 109-125.
177. Nore C., Brachet M. E., Fauve S. Numerical study of hydrodynamics using the nonlinear Schrödinger-equation // *Physica D: Nonlinear Phenomena*. – 1993. – Vol. 65(1-2). – P. 154-162.
178. Rawitscher G. H., Koltracht I. An efficient numerical spectral method for solving the Schrödinger equation // *Computing in Science and Engineering*. – 2005. – Vol. 7(6). – P. 58-66.
179. Ортега Д., Рейнболдт В. Итерационные методы решения нелинейных систем уравнений со многими неизвестными. – М.:Мир, 1975. – 560 с.
180. Hackbusch W. Iterative solution of large sparse systems of equations. – Springer International Publishing, 2016. – 509 с.
181. Hageman L. A., Young D. M. Applied Iterative Methods. – Academic press, 1981. – 416 с.
182. Trofimov V. A., Loginova M. M. Comparison of some difference schemes for the problem of femtosecond pulse interaction with semiconductor in the case of nonlinear mobility coefficient // In Book "Lecture Notes in Computer Science" / Editors Z.Li et al. – Springer. 2005. – Vol. 3401. – P.535-542.
183. Логинова М. М., Трофимов В. А. Об эффективности некоторых разностных схем для задач нелинейного взаимодействия оптического излучения с полупроводником // *Дифференциальные уравнения*. – 2006. – Т. 42(8) – С. 1123-1131.
184. Hockney R. W. A fast direct solution of Poisson's equation using Fourier analysis // *Journal of the ACM (JACM)*. – 1965. – Vol. 12(1). – P. 95-113.
185. Cooley J. W., Tukey J. W. An algorithm for the machine calculation of complex Fourier series // *Mathematics of computation*. – 1965. – Vol. 19(90) – P. 297-301.
186. Dorr F. W. The direct solution of the discrete Poisson equation on a rectangle // *SIAM review*. – 1970. – Vol. 12(2). – P. 248-263.

187. Buzbe B. L., Golub G. H., Nielson C. W. On direct methods for solving Poisson's equations // SIAM Journal on Numerical analysis. – 1970. – Vol. 7(4). – P. 627-656.
188. Temperton C. Direct methods for the solution of the discrete Poisson equation: some comparisons // Journal of Computational Physics. – 1979. – Vol. 31(1). – P. 1-20.
189. Wilhelmson R. B., Ericksen J. H. Direct solutions for Poisson's equation in three dimensions // Journal of Computational Physics. – 1977. – Vol. 25(4). – P. 319-331.
190. Schumann U., Sweet R. A. Fast Fourier transforms for direct solution of Poisson's equation with staggered boundary conditions// Journal of Computational Physics. – 1988. – Vol. 75(1). – P. 123-137.
191. Elliot D. F., Rao K. R. Fast Fourier Transforms: Algorithms, Analysis, and Applications. – Academic Press, 1982. – 488 c.
192. Guessoum A., Mersereau R. Fast algorithms for the multidimensional discrete Fourier transform // IEEE transactions on acoustics, speech, and signal processing. – 1986. – Vol. 34(4). – P. 937-943.
193. Schatzman J. C. Accuracy of the discrete Fourier transform and the fast Fourier transform // SIAM Journal on Scientific Computing. – 1996. – Vol. 17(5). – P. 1150-1166.
194. Boyd J. P. Chebyshev and Fourier spectral methods. – Courier Corporation, 2001. – 662 c.
195. Li Y. A parallel monotone iterative method for the numerical solution of multidimensional semiconductor Poisson equation // Computer Physics Communications. – 2003. – Vol. 153(3). – P. 359-372.
196. Lai M. C., Li Z., Lin X. Fast solvers for 3D Poisson equations involving interfaces in a finite or the infinite domain // Journal of computational and applied mathematics. – 2006. – Vol. 191(1). – P. 106-125.
197. Wang T. J., Sun T. A spectral method for solving nonhomogeneous Neumann boundary value problems on quadrilaterals // Applied Numerical Mathematics. – 2020. – Vol. 157. – P. 1-18.
198. Shiferaw A., Mittal R. C. An efficient direct method to solve the three dimensional Poisson's equation // American Journal of Computational Mathematics. – 2011. – Vol. 1(04). – P. 285.
199. www.intel.com
200. www.wolfram.com/mathematica/
201. www.mathworks.com/products/matlab.html
202. Тихонов А. Н., Самарский А. А. Уравнения математической физики. // М.: Наука. – 1966. – 724 с.

203. Jeffreys H. *Methods of Mathematical Physics* (3rd Edition). – Cambridge Mathematical Library, 1972. – 718 p.
204. Atkinson K., Hansen O., Chien D. A spectral method for elliptic equations: The Neumann problem // *Advances in Computational Mathematics*. – 2011. – Vol. 34(3). – P. 295-317.
205. Murray J. D. *Mathematical Biology II: Spatial Models and Biomedical Application*. – Springer, 2003. – 814 p.
206. Keller E. F., Segel L. A. Model for chemotaxis // *Journal of theoretical biology*. – 1971. – Vol. 30(2). – P. 225-234.
207. Honig B., Nicholls A. Classical electrostatics in biology and chemistry // *Science*. – 1995. – Vol. 268(5214). – P. 1144-1149.
208. Rodenberger D. C., Heflin J. R., Garrto A. F. Excited-state enhancement of optical nonlinearities in linear conjugated molecules // *Nature*. – 1992. – Vol. 359(6393). – P. 309-311.
209. Li C., Deng X. X., Wang Y. X. Nonlinear absorption and refraction in multilevel organic molecular system // *Chinese Physics Letters*. – 2000. – Vol. 1(8). – P. 574-576.
210. Ильин В. П. Численные методы решения задач электрофизики. – М.: Наука, 1985. – 335с.
211. Diaz J. I., Galiano G. Existence and uniqueness of solutions of the Boussinesq system with nonlinear thermal diffusion // *Topological Methods in Nonlinear Analysis*. – 1998. – Vol. 11(1). – P. 59–82.
212. Huang W. et al. Steady states of Fokker–Planck equations: I. existence // *Journal of Dynamics and Differential Equations*. – 2015. – Vol. 27(3). – P. 721-742.
213. Friedman A. *Partial Differential Equations of Parabolic Type*. – Dover Publications, 2008. – 368 p.
214. Самарский А. А., Галактионов В. А., Курдюмов С.П. [и др.] Режимы с обострением в задачах для квазилинейных параболических уравнений. – М.: Наука, 1987. – 480 с.
215. Ладыженская О. А., Уральцева Н. Н. Линейные и квазилинейные уравнения эллиптического типа. – М.: Наука, 1973. – 576 с.
216. Бондаренко О. С., Математическое моделирование некоторых проблем оптической бистабильности на основе полупроводников: кандидатская диссертация: 05.13.18. – М., 1997.
217. Логинова М. М, Трофимов В. А. Разностная схема для задачи воздействия фемтосекундного импульса на полупроводник при нелинейной подвижности // *ЖВМ и МФ*. – 2005. – Т. 45, №12 – С. 2185-2196.

218. Колмогоров А., Фомин С. Элементы теории функций и функционального анализа. – М.: Наука, 1976. – 544 с.
219. Самарский А. А., Гулин А. В. Устойчивость разностных схем. – М.: Наука, 1973. – 416 с.
220. Milonni P. W. Fast light, slow light and left-handed light. – CRC Press, 2004. – 243 p.
221. Boyd R. W. Slow and fast light: fundamentals and applications // Journal of Modern Optics. – 2009. – Vol. 56(18-19). – P. 1908-1915.

Список публикаций автора по теме диссертации

Публикации автора по теме диссертации в изданиях, индексируемых в базах данных Web of Science, Scopus, RSCI, а также в изданиях, рекомендованных для защиты в диссертационном совете

- A1. Trofimov V. A., Loginova M. M., Egorenkov V. A. Laser-induced 2D periodic structures of charged particles concentration in semiconductor under the condition of optical bistability existence // Proceedings of SPIE. – 2013. – Vol. 8847. – P. 88470G (15 pages). [WoS; Scopus SJR=0.17]
- A2. Trofimov V. A., Loginova M. M., Egorenkov V. A. Influence of external electric field on laser-induced wave process occurring in semiconductor under the femtosecond pulse acting // Proceedings of SPIE. – 2014. – Vol. 9127. – P. 912709 (12 pages). [WoS; Scopus SJR=0.17]
- A3. Trofimov V. A., Egorenkov V. A., Loginova M. M. Helical auto-waves electron-hole plasma in semiconductor induced by femtosecond pulse at presence of external electric field // Proceedings of SPIE. – 2014. – Vol. 9200. – P. 920004 (13 pages). [WoS; Scopus SJR=0.17]
- A4. Trofimov V. A., Egorenkov V. A., Loginova M. M. Developing of 2D helical waves in semiconductor under the action of femtosecond laser pulse and external electric field // Proceedings of SPIE. – 2015. – Vol. 9586. – P. 95860K (14 pages). [WoS; Scopus SJR=0.17]
- A5. Trofimov V. A., Egorenkov V. A., Loginova M. M. Ultrafast switching based on field optical bistability in nano-film of semiconductor // Proceedings of SPIE. – 2016. – Vol. 9920. – P. 992029 (11 pages). [WoS; Scopus SJR=0.17]
- A6. Trofimov V. A., Loginova M. M., Egorenkov V. A. Conservative finite-difference scheme for computer simulation of field optical bistability // Numerical Analysis and Its Applications (NAA 2016). Lecture Notes in Computer Science. – 2017. – Vol. 10187. – P. 682–689. [WoS IF=0.3, Q4; Scopus SJR=0.32, Q4]
- A7. Trofimov V. A., Loginova M. M., Egorenkov V. A. Fast and slow light observation at laser pulse interaction with contrast structures induced in semiconductor due to its nonlinear absorption and optical beam diffraction // Proceedings of SPIE. – 2018. – Vol. 10755. – P. 107550A (16 pages). [WoS; Scopus SJR=0.17]

- A8. Trofimov V. A., Loginova M. M., Egorenkov V. A. Switching waves dynamics in optical bistable cavity-free system at femtosecond laser pulse propagation in semiconductor under light diffraction // Proceedings of SPIE. – 2018. – Vol. 10522. – P. 105221M (7 pages). [WoS; Scopus SJR=0.17]
- A9. Trofimov V. A., Loginova M. M., Egorenkov V. A. Conservative finite-difference scheme and two-stage iteration process of its realization for the 2D problem of semiconductor plasma generation by femtosecond pulse // Communications in Computational Physics. – 2018. – Vol. 23(5). – P. 1512–1533. [WoS IF=3.07, Q1; Scopus SJR=1.06, Q1]
- A10. Trofimov V. A., Loginova M. M., Egorenkov V. A. A mathematical model of optical bistability and the multiplicity of its solutions // Journal of Computational and Applied Mathematics. – 2019. – Vol. 354. – P. 663–681. [WoS IF=2.52, Q1; Scopus SJR=0.8, Q2]
- A11. Trofimov V. A., Loginova M. M., Egorenkov V. A. Conservative finite-difference scheme for computer simulation of contrast 3D spatial-temporal structures induced by a laser pulse in a semiconductor // Mathematical Methods in the Applied Sciences. – 2020. – Vol. 43(7). – P. 4895–4917. [WoS IF=2.39, Q1; Scopus SJR=0.63, Q1]
- A12. Trofimov V. A., Loginova M. M., Egorenkov V. A. Conservative finite-difference scheme for the 2D problem of femtosecond laser pulse interaction with kink structure of high absorption in semiconductor. // International Journal of Computer Mathematics. – 2020. – Vol. 97(1-2). – P. 207–244. [WoS IF=1.72, Q2; Scopus SJR=0.53, Q2] -
- A13. Trofimov V. A., Loginova M. M., Egorenkov V. A. Numerical methods for solving the 3D Neumann problem of laser-induced plasma evolution in a semiconductor: Direct and iteration methods // Computational and Mathematical Methods. – 2021. – Vol. 3(3). – P. e1089. [WoS IF=0.5, Q3; Scopus SJR=0.3, Q3]
- A14. Trofimov V. A., Loginova M. M., Egorenkov V. A. Multi-Stages Iterative Process for Conservative Economic Finite-Difference Schemes Realization for the Problem of Nonlinear Laser Pulse Interaction with a Medium // Nonlinear phenomena in complex systems. – 2021. – Vol. 24(3). – P. 242-259. [RSCI; WoS; Scopus SJR=0.25, Q4; РИНЦ ИФ=0.296]

Иные публикации

- A15. Trofimov V. A., Loginova M. M., Egorenkov V. A. Conservative finite-difference schemes for 2D problem of femtosecond pulse propagation in semiconductor // Proceedings of the CMMSE'2013. – Almería, Spain, 2013. – Vol. 5. – P. 1767–1776.
- A16. Trofimov V. A., Loginova M. M., Egorenkov V. A. 2D wave structure induced by femtosecond laser pulse in semiconductor // Advanced Optoelectronics and Lasers (CAOL). IEEE Conference Publications. – 2013. – P. 296–298. [Scopus]
- A17. Trofimov V. A., Loginova M. M., Egorenkov V. A. New two-step iteration process for solution of semiconductor plasma generation problem with arbitrary boundary conditions in 2D case // WIT transactions on modelling and simulation. – 2015. – Vol. 59. – P. 85–96.
- A18. Trofimov V. A., Loginova M. M., Egorenkov V. A. Realization of S-type and N-type hysteresis loops at femtosecond laser pulse action in semiconductor // Frontiers in Optics 2017, OSA Technical Digest (online) (Optica Publishing Group). - 2017. - Paper JTu3A.58. (2 pages). [Scopus]