

На правах рукописи



Поляков Сергей Владимирович

Математическое моделирование с помощью многопроцессорных вычислительных систем процессов электронного транспорта в вакуумных и твердотельных микро- и наноструктурах

Специальность 05.13.18

Математическое моделирование, численные методы
и комплексы программ

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Москва 2010

Работа выполнена в Институте математического моделирования РАН

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук,
Хренов Григорий Юрьевич

доктор физико-математических наук,
профессор Злотник Александр Анатольевич

доктор физико-математических наук,
профессор Крюков Виктор Алексеевич

Ведущая организация:

Физико-технологический институт РАН

Защита состоится 24 марта 2011 г. в 11.00 на заседании диссертационного совета Д.002.024.03 при Институте прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН по адресу: 125047, Москва, Миусская пл., д. 4

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ИПМ им. М.В. Келдыша РАН

Автореферат разослан «31» января 2011 г.

Ученый секретарь диссертационного совета,
доктор физико-математических наук



Змитренко Н.В.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы

Диссертационная работа посвящена созданию математических методов исследования, параллельных численных алгоритмов и комплексов программ для моделирования с помощью современных многопроцессорных вычислительных систем неравновесных электронных процессов в микро- и наноструктурах твердотельной и вакуумной электроники. Мотивацией для проведения работ в данном направлении была необходимость создания математических основ вычислительного эксперимента в относительно новой прикладной области, фундаментальный характер предполагаемых исследований, ориентация на использование современной суперкомпьютерной техники ввиду чрезвычайной вычислительной сложности анализируемых математических моделей.

Анализ современного состояния методов математического моделирования в выбранной прикладной области показывает, что в связи с необходимостью учета различных геометрических масштабов и сильно разнородных физических процессов в рамках одной задачи востребованы смешанные математические модели, включающие одновременно классические, полуклассические и квантовые описания электронных процессов в микро- и наноструктурах. При этом базовым подходом является чаще всего приближение механики сплошной среды, используемое как в классическом, так и в квантовом представлении.

Основу классических описаний в модели сплошной среды составляют либо диффузионно-дрейфовое, либо квазигидродинамическое приближения, которые могут рассматриваться как в стационарном, так и в нестационарном случаях в пространстве от одного до трех измерений. В качестве неизвестных функций, как правило, фигурируют концентрации, импульсы и энергия носителей заряда различного типа, а также потенциалы самосогласованного электрического и/или магнитного поля. В результате классическая часть модели представляется в виде системы нелинейных эволюционных уравнений динамики заряженных частиц, взаимодействующих в самосогласованном поле.

Основу квантовых описаний в модели сплошной среды составляют уравнения Шредингера в дифференциальной форме, записанные чаще всего для одночастичных волновых функций. Для этих уравнений, как правило, рассматривается стационарная задача, которая в случае дискретного спектра в пространстве энергий частиц приводит к задаче на собственные значения, а в случае непрерывного спектра – к набору параметрически связанных краевых задач. Учитывая особое внимание к микро- и наноструктурам с одномерным или двумерным электронным газом в связи с перспективами их применения в качестве базовых элементов новой электроники, выделим из общего ряда задачи моделирования одномерного электронного транспорта в квантовых структурах, которые чаще всего базируются на решении

стационарной задачи туннелирования в приближении Хартри-Фока с учетом электрон-электронных взаимодействий и корреляционных эффектов.

Сочетание в одной задаче классических и квантовых описаний приводит к существенному усложнению математической модели. Характерными особенностями такой модели являются, как правило, многомасштабность, нелинейность, в том числе нелокальная, некорректность в отдельных случаях, неоднородность по пространству и времени, большое число неизвестных функций. Эти особенности предъявляют повышенные требования к численным алгоритмам анализа таких моделей и вызывают необходимость применения современной компьютерной и суперкомпьютерной техники в численных экспериментах. Примеров успешного решения такого рода сложных проблем в данной прикладной области не так много. Поэтому в каждом конкретном случае приходится разрабатывать новые математические методы и их компьютерные реализации. Не является исключением и настоящая диссертационная работа, в которой большинство из использованных математических моделей были относительно новыми и не имели развитой вычислительной базы для их детального анализа и соответственно результатов моделирования. Экспериментальные данные в выбранных приложениях до сих пор остаются неполными и имеют фрагментарный характер, не позволяющий сделать однозначные выводы о природе исследуемых физических процессов.

Цели и задачи диссертации

Основной целью данной диссертации было создание математических основ для моделирования с помощью современных многопроцессорных вычислительных систем неравновесных электронных процессов в микро- и наноструктурах твердотельной и вакуумной электроники и проведение вычислительных экспериментов для ряда актуальных проблем из данной предметной области. В качестве конкретных прикладных задач были рассмотрены проблемы моделирования процессов примесного пробоя и одномерного электронного транспорта в квантовых каналах наноструктур на основе AlGaAs, электронной эмиссии из кремниевых автоэммиттеров субмикронных размеров, образования и миграции пор в межсоединениях электронных схем в современных чипах в результате электрических и термомеханических воздействий. Все эти задачи объединяет сильная нелинейность и многомасштабность моделируемых процессов, а также повышенная сложность при численной, а затем и компьютерной реализации.

В рамках указанной прикладной тематики в диссертации стояли следующие задачи:

- на основе предварительного анализа разработать или выбрать наиболее адекватные математические модели изучаемых процессов;
- разработать эффективные численные методы для анализа используемых математических моделей;

- реализовать численные методики в виде комплексов последовательных и/или параллельных программ;
- провести детальное компьютерное моделирование исследуемых процессов и выработать рекомендации для специалистов из выбранных предметных областей;
- обобщить полученные математические результаты на случай более общих постановок задач из выбранных классов.

Методы исследования

В настоящей диссертационной работе применялся практически весь аппарат методов математического моделирования. Однако основу его составили сеточные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений и уравнений с частными производными. При построении пространственно-временных аппроксимаций дифференциальных уравнений использовались методы конечных разностей и конечных объемов, применяемые как на ортогональных, так и на нерегулярных треугольных и тетраэдральных сетках. При построении нерегулярных треугольных и тетраэдральных сеток использовались прямые методы типа Делоне. Для некоторых построенных численных схем проводился анализ устойчивости и сходимости с помощью принципа максимума и/или метода энергетических неравенств. Для решения систем линейных алгебраических уравнений, возникающих в результате сеточных аппроксимаций дифференциальных уравнений, использовались как прямые методы (методы прогонки и преобразования Фурье), так и итерационные (метод переменных направлений и схема сопряженных градиентов с предобусловливателем Якоби и неполного разложения Холецкого). Для решения систем нелинейных уравнений использовались метод простой итерации и метод Ньютона. Для преодоления проблемы большой размерности сеточных задач использовались методы свертки решения, продолжения решения по малому параметру, локально-одномерный подход. Для частичного разрешения проблемы многомасштабности моделируемых процессов использовался метод введения параметра порядка. Для верификации полученных численных результатов проводилось их сравнение с известными теоретическими фактами и экспериментальными и расчетными данными других исследователей.

Научная новизна

Научная новизна полученных в диссертации результатов состоит в следующем.

Во-первых, в работе исследуются новые математические модели, описывающие электронные процессы в микро- и наноструктурах и разработанные автором совместно со специалистами и коллегами из Фрязинского филиала ИПЭ РАН, МГТУ «СТАНКИН», LSI Logic Incorporation. В качестве таковых можно указать модели примесного пробоя и одномерного электронного транспорта в наноструктурах на основе AlGaAs, модель неравновесного электронного транспорта в кремниевом

автоэммиттере субмикронных размеров, модель процессов электро-, термо- и стресс миграции в медных межсоединениях электронных схем.

Во-вторых, в диссертации разработаны оригинальные численные методы анализа изучаемых процессов на базе как традиционных, так и новых математических моделей. Среди развитых численных подходов отметим конечно-объемные схемы экспоненциальной подгонки для решения начально-краевых задач для эволюционных уравнений на ортогональных и нерегулярных треугольных и тетраэдральных сетках, методику регуляризации и численные методы решения пространственно одномерных нелокально нелинейных квантовых задач в приближении Хартри-Фока.

В третьих, автором созданы новые параллельные алгоритмы и комплексы программ, реализующие разработанные численные методы, а именно, параллельные реализации конечно-объемных схем экспоненциальной подгонки на ортогональных и нерегулярных сетках в одномерном, двумерном и трехмерном случаях, а также параллельный алгоритм решения нелокально нелинейной системы уравнений Шредингера большой размерности, используемый для моделирования одномерного электронного транспорта в квантовом канале наноструктуры и включающий методику балансировки загрузки вычислителей.

В-четвертых, в работе проведены численные исследования задач, для которых натурные эксперименты и вычисления других авторов либо отсутствуют, либо весьма фрагментарны. В частности:

- проведено численное моделирование задачи о примесном пробое в наноструктуре на основе AlGaAs, для которой в литературе имелись только теоретические оценки;
- выполнено численное исследование процессов переноса фотоиндуцированных носителей заряда в слое двумерного электронного газа наноструктуры на основе AlGaAs с целью определения возможностей оптической диагностики таких структур на этапе роста (ранее для данной задачи известны были только результаты нескольких натуральных экспериментов, проведенных во Фрязинском филиале ИРЭ РАН);
- проведен детальный численный анализ одномерного электронного транспорта в квантовом канале наноструктуры на основе AlGaAs (ранее для данной задачи имелись отдельные теоретические оценки и результаты зарубежных натуральных экспериментов, напрямую не позволяющие судить о физической основе транспорта);
- выполнено детальное численное исследование задачи об электронной эмиссии из кремниевого автоэммиттера субмикронных размеров в различных пространственных постановках (одномерной, двумерной, трехмерной), в том числе, с учетом реальной геометрии катодной ячейки (ранее для анализа экспериментальных данных в этой области обычно использовались оценки на основе упрощенной модели, не отражающей особенностей распределения электрического поля и электронного транспорта в реальных микрокатадах.

Теоретическая и практическая ценность

Теоретическая и практическая ценность результатов диссертации заключается в ниже следующем.

- Совместно со специалистами в области твердотельной и вакуумной микро- и нанoeлектроники разработаны новые математические модели, более адекватно воспроизводящие моделируемые процессы и явления.
- Разработаны новые эффективные численные методы компьютерного анализа используемых математических моделей.
- Разработаны новые подходы к параллельной реализации традиционных и новых численных алгоритмов с целью использования их при моделировании с помощью современных суперкомпьютерных систем.
- На основе предложенных математических моделей и разработанных численных методов созданы комплексы программ для персональных и суперкомпьютеров, позволяющие проводить детальные исследования задач из выбранных прикладных областей. Один из комплексов внедрен в промышленную систему моделирования.
- С помощью разработанных комплексов программ изучены механизмы пробоя наноструктуры на основе AlGaAs и развития зарядовой и спиновой неустойчивости в квантовом канале такой наноструктуры, выявлены возможности неразрушающей оптической диагностики наноструктур в процессе их роста, исследованы особенности электронного транспорта в кремниевых микроавтоэммитерах и рассчитаны их эмиссионные характеристики, получены реалистичные данные о процессе образования и миграции пор в межсоединениях электронных схем под действием протекающего по ним тока.

Личный вклад соискателя

В диссертационной работе представлены результаты, полученные при решающем вкладе соискателя. Основные результаты диссертации получены лично соискателем.

Достоверность и обоснованность результатов

Достоверность и обоснованность полученных в диссертации результатов определяется их анализом (отдельные предложенные численные методы исследованы на устойчивость и сходимостъ) и верификацией при разнообразном тестировании, включающем сравнение с точными решениями (при их наличии), сравнением с результатами экспериментов и расчетами по другим моделям, ясным физическим смыслом полученных результатов и согласованностью с современными представлениями о предмете исследования.

Апробация работы

Результаты исследований, приведенных в диссертационной работе, были представлены и обсуждались на 40 всероссийских и международных конференциях:

- The Third International Congress on Industrial and Applied Mathematics (ICIAM'95), Hamburg (Germany), July, 3-7, 1995.
- 2-ая Российская конференция по физике полупроводников, г. Зеленогорск, 26 февраля - 1 марта 1996 г.
- 23-rd International Symposium on Compound Semiconductors, 23-27 September, 1996, S.-Peterburg, Russia.
- 4-ый Международный симпозиум "Наноструктуры: Физика и Технология - 96", С.-Петербург, 23-27 сентября 1996 г.
- 5-ый Международный симпозиум "Наноструктуры: Физика и Технология - 97", С.-Петербург, 23-27 июня 1997 г.
- Третья международная научная конференция "Математические модели нелинейных возбуждений, переноса, динамики, управления в конденсированных системах и других средах", Тверь, 29 июня - 3 июля 1998 г.
- Fourth Int. Conf. on Numerical Methods and Applications – NMA'98, Sofia (Bulgaria), 19-23 August 1998.
- 6-ой Международный симпозиум "Наноструктуры: Физика и Технология", С.-Петербург, 22-26 июня 1998 г.
- 7-ой Международный симпозиум "Наноструктуры: Физика и Технология", С.-Петербург, 14-18 июня 1999 г.
- Четвертый Всероссийский семинар "Проблемы теоретической и прикладной электронной оптики", Москва, 21-22 октября 1999 г.
- IV Российская конференция по физике полупроводников "Полупроводники 99", Новосибирск, 25-29 октября 1999 г.
- 12-th Internatinal Vacuum Microelectronics Conference, IVMC'99, Darmstadt (Germany), July 6-9, 1999.
- Международная конференция "Математическая физика, математическое моделирование и приближенные методы", посвященная памяти академика Андрея Н. Тихонова, Обнинск, 15-19 мая 2000 г.
- 4-ая Международная научная конференция "Математические модели нелинейных возбуждений, переноса, динамики, управления в конденсированных системах и других средах", г. Москва, 27 июня - 1 июля 2000 г.
- 8-ой Международный симпозиум "Наноструктуры: Физика и Технология", С.-Петербург, 19-23 июня 2000 г.
- 3-rd International Conference "Finite Difference Schemes: Theory and Applications (FDS-2000)", Palanga, Lithuania, Sept. 1-4, 2000.

- Всероссийская научная конференция "Высокопроизводительные вычисления и их приложения", Черноголовка, 30 октября - 2 ноября 2000 г.
- 13-th International Vacuum Microelectronics Conference, IVMC'00, Darmstadt, Germany, July 6-9, 2000.
- 6th International Computational Accelerator Physics Conference (ICAP 2000), Darmstadt (Germany), Sept. 11-14, 2000.
- Second International Conference "MODERN TRENDS in COMPUTATIONAL PHYSICS – MTCP2000", Dubna (Russia), July 24-29, 2000.
- Int. Conf. "Displays and Vacuum Electronics (DVE 2001)", Garmish-ParteanKirche (Germany), May 2-3, 2001.
- Int. Conf. "Dynamical systems modelling and stability investigation", Kyiv (Ukraine), May 22-25, 2001.
- 4th International Vacuum Electron Sources Conference (IVESC'2002), Saratov (Russia), July 15-19, 2002.
- V International Conference on Numerical Methods and Applications – NM & A 02, Borovets (Bulgaria), August 20-24, 2002.
- Четвёртый Всероссийский семинар "Сеточные методы для краевых задач и приложения", Казань, 13-16 сентября 2002 г.
- 5th International Congress on Mathematical Modeling, Dubna (Russia), September 30 - October 6, 2002.
- Международная конференция "Математические идеи П.Л. Чебышева и их приложение к современным проблемам естествознания", Обнинск, 14-18 мая 2002 г.
- Пятый Всероссийский семинар "Сеточные методы для краевых задач и приложения", посвященный 200-летию Казанского государственного университета, Казань, 17-21 сентября 2004 г.
- IV International Congress on Mathematical Modeling, Nizhny Novgorod (Russia), September 20-26, 2004.
- Всероссийская научная конференция «Научный сервис в сети: технологии параллельного программирования», Новороссийск, 18-23 сентября 2006 г.
- Международная научная конференция «Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ'2007)», Челябинск, 29 января - 2 февраля 2007 г.
- Восьмой всероссийский семинар "Проблемы теоретической и прикладной электронной и ионной оптики", Москва, 29-31 мая 2007 г.
- Всероссийская научная конференция "Научный сервис в сети Интернет: многоядерный компьютерный мир. 15 лет РФФИ", Новороссийск, 24-29 сентября 2007 г.
- Седьмой Всероссийский семинар "Сеточные методы для краевых задач и приложения", Казань, 21-24 сентября 2007 г.

- XIV научно-техническая конференция с участием зарубежных специалистов «Вакуумная наука и техника», Сочи, 8-15 октября 2007 г.
- Всероссийская научная конференция "Научный сервис в сети Интернет: решение больших задач", Новороссийск, 22-27 сентября 2008 г.
- Международная научная конференция "Моделирование нелинейных процессов и систем", Москва, 14-18 октября 2008 г.
- Девятый Всероссийский семинар "Проблемы теоретической и прикладной электронной и ионной оптики", Москва, 27-29 мая 2009 г.
- International Conference «Mathematical Modeling and Computational Physics (MMCP'2009)», Dubna, July 7-11, 2009.
- Всероссийская суперкомпьютерная конференция "Научный сервис в сети ИНТЕРНЕТ. Масштабируемость, параллельность, эффективность", Абрау-Дюрсо, 21-26 сентября 2009 г.

Результаты работы обсуждались на рабочих семинарах ИММ РАН, НИВЦ МГУ, МСЦ РАН, РИЦ «Курчатовский институт».

Реализация и внедрение результатов работы

Работа выполнена в Институте математического моделирования РАН и включает результаты пятнадцатилетних исследований соискателя по созданию математических моделей, численных методов, параллельных алгоритмов и комплексов программ для моделирования актуальных научно-технических задач в области твердотельной и вакуумной микро- и наноэлектроники.

Работа выполнялась в рамках научных планов Института математического моделирования РАН, проектов Программ фундаментальных исследований Президиума и Отделения математических наук РАН, проектов Российского фонда фундаментальных исследований, проектов ИНТАС, проекта Научно-технической программы Союзного государства «Разработка и использование программно-аппаратных средств Грид-технологий перспективных высокопроизводительных (суперкомпьютерных) вычислительных систем семейства «СКИФ», проектов Центра математического моделирования ИММ РАН – МГТУ «СТАНКИН», а также в рамках научного сотрудничества с компанией LSI Logic Incorporation (США) – производителем чипов для персональных и промышленных компьютеров.

Научные положения диссертации и разработанные на их основе методики, алгоритмы и программные комплексы использовались для совместных исследований в следующих организациях: Фрязинский филиал Института радиотехники и электроники им. В.А. Кательникова РАН, ФГУП «НИИФП им. Ф.В. Лукина», Центр математического моделирования ИММ РАН – МГТУ «СТАНКИН», LSI Logic Incorporation.

Результаты работы, посвященные параллельной реализации численных алгоритмов, вошли в основу учебного курса «Параллельные вычисления в микроэлектронике», читаемом автором на базовой кафедре математического

моделирования Московского государственного института электронной техники (технического университета).

Основные публикации

По теме диссертации опубликовано 54 работы, из них 21 – статьи в ведущих отечественных и зарубежных рецензируемых журналах, в том числе 14 – статьи в российских рецензируемых журналах из списка ВАК. Основные публикации приведены в конце автореферата в составе списка литературы (первые 34 ссылки) и выделены курсивом.

Структура и объем работы

Диссертация состоит из введения, семи глав, заключения, списка используемой литературы. Объем диссертации составляет 354 страниц. Список использованных источников насчитывает 513 наименований.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении на основе обзора литературы сформулирован круг проблем из области математического моделирования в задачах твердотельной и вакуумной микро- и нанoeлектроники, на решение которых направлено диссертационное исследование, обоснована их актуальность, представлены конкретные цели и задачи диссертации, определены методы исследования. Далее сформулированы кратко основные результаты работы, рассмотрены их новизна, теоретическая и практическая ценность, достоверность и обоснованность. Приведены сведения о личном вкладе автора, апробации и внедрении полученных результатов.

В первой главе разрабатываются вычислительные основы для моделирования электронных процессов в микро- и наноструктурах твердотельной и вакуумной электроники.

В п. 1.1 рассматриваются математические модели, используемые для описания задач из выбранных классов. Все они построены в рамках приближения сплошной среды. Для описания классической динамики заряженных частиц в твердых телах выбраны диффузионно-дрейфовая [35-39] и квазигидродинамическая [40-47] модели (ДДМ и КГДМ).

Диффузионно-дрейфовая модель записывается в предположении о том, что при внешнем воздействии на рассматриваемую структуру локально изменяются только концентрации заряженных частиц [35-39]. ДДМ для полупроводниковых структур включает уравнения неразрывности для концентраций электронов и дырок, массовые балансные уравнения для концентраций примесей, уравнение теплопроводности и уравнение Пуассона для потенциала самосогласованного электрического поля во всей структуре. Модель дополняется граничными и начальными условиями. Для уравнений неразрывности на границах обычно задаются либо постоянные

концентрации электронов, дырок и примесей, либо их потоки, связанные с процессами поверхностной рекомбинации и/или захвата на поверхностных примесях. Граничные условия для уравнения теплопроводности ставятся в виде условий Дирихле (задана температура окружающей среды), Неймана (структура теплоизолирована), Ньютона (задан теплообмен с окружающей средой) или смешанных. Граничные условия для потенциала электрического поля задаются в виде условий Дирихле или условий на протекающий в цепи ток на контактах и условий Неймана на диэлектрических поверхностях.

В диссертации (гл. 4, 6) для полупроводниковой структуры, содержащей объемные примеси обоих типов (доноры и акцепторы), локальное равновесие в которой нарушается вследствие электрического или оптического воздействия, использовался следующий вариант ДДМ:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = +\frac{1}{e} \operatorname{div} \mathbf{j}_n + G_n - R_n, \quad \mathbf{j}_n = e\mu_n n \mathbf{E} + eD_n \nabla n, \quad (1)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{e} \operatorname{div} \mathbf{j}_p + G_p - R_p, \quad \mathbf{j}_p = e\mu_p p \mathbf{E} - eD_p \nabla p,$$

$$\frac{\partial n_D}{\partial t} = G_D - R_D, \quad \frac{\partial p_A}{\partial t} = G_A - R_A, \quad (2)$$

$$\operatorname{div}(\epsilon \mathbf{E}) = -4\pi e(n - p + n_D - p_A), \quad \mathbf{E} = -\nabla \varphi, \quad (3)$$

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = -\operatorname{div} \mathbf{Q}_T + (\mathbf{j}_n + \mathbf{j}_p, \mathbf{E}) + G_T - R_T, \quad \mathbf{Q}_T = -\kappa_T \nabla T. \quad (4)$$

Здесь n и p – объемные концентрации свободных неравновесных электронов и дырок, n_D и p_A – объемные концентрации связанных электронов на донорах и дырок на акцепторах, \mathbf{j}_n и \mathbf{j}_p – плотности объемных токов свободных электронов и дырок, e – элементарный заряд, равный заряду электрона, μ_n , μ_p и D_n , D_p – объемные коэффициенты подвижности и диффузии электронов и дырок, связанные соотношениями:

$$D_n = \mu_n k_B T, \quad D_p = \mu_p k_B T, \quad (5)$$

k_B – постоянная Больцмана, T – температура решетки, G_k и R_k ($k = n, p, D, A$) – темпы генерации и рекомбинации соответствующих носителей заряда, удовлетворяющие принципу детального равновесия [36]

$$G_n - G_p + G_D - G_A - R_n + R_p - R_D + R_A = 0, \quad (6)$$

\mathbf{E} и φ – напряженность и потенциал электрического поля, ϵ – диэлектрическая проницаемость структуры, ρ – плотность, c_p – теплоемкость при постоянном давлении, \mathbf{Q}_T – плотность потока энергии, κ_T – коэффициент теплопроводности, G_T и R_T – темпы генерации и релаксации энергии, div и ∇ – операторы дивергенции и

градиента в декартовых координатах (x, y, z) , t – время. Уравнения (1)-(4) записываются в ограниченной области Ω с границей $\partial\Omega$ для $t > 0$.

Начальные условия для уравнений (1), (2) и (4) можно записать в виде

$$n|_{t=0} = n_0, \quad p|_{t=0} = p_0, \quad n_A|_{t=0} = n_{A0}, \quad p_A|_{t=0} = p_{A0}, \quad T|_{t=0} = T_0. \quad (7)$$

Условия на границе могут иметь весьма разнообразный вид. Для примера зададим нормальные компоненты плотностей электронного и дырочного токов j_n^0 и j_p^0 , распределение потенциала φ_n и температуру окружающей среды T_0 :

$$(\mathbf{j}_n, \mathbf{n})|_{\partial\Omega} = j_n^0, \quad (\mathbf{j}_p, \mathbf{n})|_{\partial\Omega} = j_p^0, \quad \varphi|_{\partial\Omega} = \varphi_n, \quad T|_{\partial\Omega} = T_0. \quad (8)$$

Здесь \mathbf{n} – внешняя нормаль к поверхности области Ω .

ДДМ для металлических структур содержит обычно одно уравнение неразрывности, например, для ионов (остовов атомов) основного металла, массовые балансные уравнения для ионов примесей, уравнение теплопроводности и уравнение Пуассона для потенциала электрического поля.

В обоих вариантах ДДМ может дополняться уравнениями для описания термомеханических напряжений, учитывающих изменение геометрии структур при нагреве и приложении внешних механических напряжений. В главе 7 для многослойной структуры, содержащей металлические и полупроводниковые элементы, использовались следующие квазистационарные уравнения:

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}_i &= 0, \quad (x_1, x_2, x_3) \in \Omega, \\ \boldsymbol{\sigma}_i &= (\sigma_{i1}, \sigma_{i2}, \sigma_{i3})^T \quad (i=1, 2, 3), \quad \mathbf{u} = (u_1, u_2, u_3)^T, \\ \sigma_{ii} &= (2\mu + \lambda) \frac{\partial u_i}{\partial x_i} + \lambda \sum_{j \neq i} \frac{\partial u_j}{\partial x_j} - K\alpha, \quad \sigma_{ij} = \sigma_{ji} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \gamma. \end{aligned} \quad (9)$$

Здесь $\boldsymbol{\sigma}_k$ – вектор-столбцы, составляющие тензор термоупругих напряжений, \mathbf{u} – вектор смещений, μ , λ и K – безразмерные коэффициенты Ламэ и модуль всестороннего сжатия, α и γ – функции нагрузки, возникающей при тепловом расширении структуры и изменении её массового состава, зависящие от температуры и массовых долей компонент среды. На границе структуры задаются либо компоненты вектора смещения, либо напряжения.

Квазигидродинамическая модель рассматривается в случае, когда при внешнем воздействии на рассматриваемую структуру локально изменяются не только концентрации заряженных частиц, но и их энергии [40-47]. В результате к уравнениям для концентраций, используемым в ДДМ, в КГДМ добавляются уравнения энергии для каждой системы частиц. В полупроводнике обычно рассматривают уравнения для плотности энергии электронов и дырок, а также уравнение для полной энергии структуры, которое можно записать в виде уравнения теплопроводности.

В гл. 6 диссертации исследуются двух- и трёхтемпературные варианты КГД модели для кремниевой структуры. Поэтому в дополнение к уравнениям (1), (3), (4) в этом случае добавляются одно или два уравнения для плотностей энергии электронов и дырок $w_n = \frac{3}{2}nk_B T_n$ и $w_p = \frac{3}{2}pk_B T_p$ (T_n и T_p – температуры неравновесных электронов и дырок):

$$\begin{aligned}\frac{\partial w_n}{\partial t} &= -\text{div} \mathbf{Q}_n + \tilde{G}_n - \tilde{R}_n, & \mathbf{Q}_n &= \tilde{\mu}_n n \mathbf{E} + \tilde{D}_n \nabla n, \\ \frac{\partial w_p}{\partial t} &= -\text{div} \mathbf{Q}_p + \tilde{G}_p - \tilde{R}_p, & \mathbf{Q}_p &= \tilde{\mu}_p p \mathbf{E} + \tilde{D}_p \nabla p.\end{aligned}\tag{10}$$

Здесь \mathbf{Q}_n и \mathbf{Q}_p – плотности потоков энергии электронов и дырок, $\tilde{\mu}_n$, $\tilde{\mu}_p$ и \tilde{D}_n , \tilde{D}_p – объемные коэффициенты дрейфа и диффузии плотности энергии электронов и дырок, \tilde{G}_n, \tilde{G}_p и \tilde{R}_n, \tilde{R}_p – темпы генерации и релаксации плотности энергии электронов и дырок. Начальные условия для уравнений (10) вытекают из (7). Граничные условия аналогичны (8):

$$\left(\mathbf{Q}_n, \mathbf{n}\right)\Big|_{\partial\Omega} = \mathcal{Q}_n^0, \quad \left(\mathbf{Q}_p, \mathbf{n}\right)\Big|_{\partial\Omega} = \mathcal{Q}_p^0.\tag{11}$$

Для описания электронного транспорта в мезоскопических структурах [48] с учетом квантовых эффектов в диссертации используются три модели. Первая модель базируется на кинетическом уравнении Фоккера-Планка [49-52] для симметричной части функции распределения электронов по энергии $f(t, \varepsilon)$ в нуль-мерном приближении:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left\{ A(\varepsilon) \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} + B(\varepsilon) f \right\} + G\{f\} - R\{f\} + S\{f\} = 0.\tag{12}$$

Здесь $A(\varepsilon)$, $B(\varepsilon)$ – нелинейные интегральные коэффициенты, $G\{f\}$ и $R\{f\}$ – генерационное и релаксационное слагаемые (содержащие интегралы от f), $S\{f\}$ – интеграл столкновений, $t > 0$ – время, $\varepsilon > 0$ – энергия, отсчитываемая от дна зоны проводимости.

Уравнение (12) применяется в гл. 3 для анализа низко-температурного примесного пробоя в полупроводниках типа GaAs. Оно учитывает диффузию и дрейф электронов в самосогласованном электрическом поле, процессы ударной ионизации, возбуждения и рассеяния электронов на примесях, а также парные электрон-электронные взаимодействия. Для уравнения (12) формулируется нелокальная краевая задача в ограниченной области энергий $[\varepsilon_p, \varepsilon_M]$ с условиями:

$$f(\varepsilon_p) = F\{f\}, \quad f(\varepsilon_M) = 0.\tag{13}$$

Здесь $F\{f\}$ – нелинейный функционал от f . Стационарную краевую задачу (12), (13) назовем моделью Фоккера-Планка (МФП).

Вторая модель описывает одномерный стационарный квантовый перенос электронов через заданный потенциальный барьер [53-56]. Она базируется на линейном стационарном уравнении Шрёдингера и применяется в гл. 6 для решения задачи туннелирования электронов через потенциальный барьер на границе твердое тело – вакуум. Назовем эту модель линейной моделью электронного туннельного транспорта (ЛМЭТТ). В размерном виде ее можно записать в виде:

$$\frac{\partial^2 \psi_\varepsilon}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [\varepsilon - V(x)] \psi_\varepsilon = 0, \quad x \in (0, L), \quad \varepsilon \in (0, \infty). \quad (14)$$

Здесь $\psi_\varepsilon = \psi_\varepsilon(x)$ – волновая функция электронов с энергией ε , $V(x)$ – потенциальный барьер, сосредоточенный в области $0 < x < L$, m – эффективная масса электрона, \hbar – постоянная Планка. Перенос происходит в положительном направлении слева направо. Слева и справа от барьера волновая функция имеет вид плоской волны:

$$\begin{aligned} \psi_\varepsilon(x) &= \psi_L(x) = \exp[ik_L x] + R \cdot \exp[-ik_L x], \quad x < 0; \\ \psi_\varepsilon(x) &= \psi_R(x) = T \cdot \exp[ik_R(x - L)], \quad x > L; \\ k_L &= \sqrt{\frac{2m(\varepsilon - V_L)}{\hbar^2}}, \quad k_R = \sqrt{\frac{2m(\varepsilon - V_R)}{\hbar^2}}. \end{aligned} \quad (15)$$

Здесь амплитуда падающей на барьер волны принята равной единице. Смешанные краевые условия определяются непрерывностью волновой функции и ее первой производной на границах барьера:

$$\begin{aligned} \psi_\varepsilon(0) &= \psi_L(0), \quad \psi'_\varepsilon(0) = \psi'_L(0); \\ \psi_\varepsilon(L) &= \psi_R(L), \quad \psi'_\varepsilon(L) = \psi'_R(L). \end{aligned} \quad (16)$$

Коэффициент туннелирования $D(\varepsilon)$, являющийся основной искомой характеристикой квантового переноса, по определению [53] равен:

$$\begin{aligned} D(\varepsilon) &= \frac{j_\varepsilon(L)}{j_\varepsilon(0)} = \frac{j_R}{j_L} = \frac{k_R}{k_L} |T|^2 = \sqrt{\frac{\varepsilon - V_R}{\varepsilon - V_L}} |T|^2, \\ j_\varepsilon(x) &= \frac{i\hbar}{m_e} \left(\psi_\varepsilon \frac{d\psi_\varepsilon^*}{dx} - \psi_\varepsilon^* \frac{d\psi_\varepsilon}{dx} \right). \end{aligned} \quad (17)$$

Третья модель описывает квазистационарный электронный транспорт в квантовом канале полупроводниковой наноструктуры. Возникающая здесь задача туннелирования является нелинейной и многочастичной. Однако при использовании подхода Слэтера [55] и приближения Хартри-Фока [54, 56] модель формулируется в терминах одночастичных волновых функций и учитывает изменение эффективного потенциального барьера за счет потенциалов Хартри и обменного электрон-электронного взаимодействия. Также модель учитывает разделение электронных потоков по направлению и спину. В гл. 5 данная модель рассмотрена в одномерном случае для цилиндрически симметричной геометрии. Потенциал самосогласованного электрического поля учитывается в уравнениях Шрёдингера с помощью одномерной

функции Грина. Данную модель назовем условно нелинейной моделью электронного туннельного транспорта (НМЭТТ). Запишем нелинейные уравнения Шрёдингера в операторной форме без расшифровки конкретных слагаемых:

$$\frac{\partial^2 \psi_{\varepsilon s}^{(\alpha)}}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [\varepsilon - V(x) + \mathbf{U}_s^{(\alpha)}(\Psi)] \psi_{\varepsilon s}^{(\alpha)} = 0, \quad x \in (0, L), \quad (18)$$

$$\varepsilon \in (0, \infty), \quad s = \pm 1/2, \quad \alpha = "+", "-".$$

Здесь $\psi_{\varepsilon s}^{(\alpha)}(x)$ – волновая функция электронов с энергией ε , спином s и направлением движения α , $\mathbf{U}_s^{(\alpha)}(\Psi)$ – нелинейный интегральный оператор, зависящий от всего набора волновых функций Ψ . Краевые задачи для уравнения (18) формулируются аналогично (15), (16).

В п. 1.2 рассматриваются сеточные численные методы для решения эволюционных уравнений, составляющих основу ДД и КГД моделей. Для построения сеточных аппроксимаций этих уравнений был выбран метод конечных объёмов (МКО) [57-59]. В случае расчётных областей прямоугольной формы известно множество конечно-разностных методов решения эволюционных уравнений. Они обычно конструируются так, чтобы численная схема была устойчивой, сходящейся к дифференциальному решению, консервативной и монотонной (в сильном или слабом смысле). Примером таких схем могут служить однородные консервативные монотонные схемы А.А. Самарского [60], а также слабо монотонные консервативные схемы Е.И. Голанта [61] и Н.В. Кареткиной [62]. В диссертации предложены обобщения этих схем на случай различной размерности и сеток различного типа.

Рассмотрим в ограниченной области D трехмерного евклидова пространства модельное эволюционное уравнение общего вида

$$\frac{\partial u}{\partial t} = Lu + f, \quad \mathbf{r} \in D, \quad t > 0, \quad (19)$$

$$Lu \equiv \operatorname{div}(\mathbf{K}\nabla u + \mathbf{E}u) + (\mathbf{F}, \nabla u) - qu, \quad (20_1)$$

матричные, векторные и скалярные коэффициенты которого $\mathbf{K} = \{K_{\alpha\beta}\}_{\alpha,\beta=1,2,3}$, $\mathbf{E} = (E_\alpha)^T$, $\mathbf{F} = (F_\alpha)^T$ ($\alpha = 1, 2, 3$), q и f зависят от пространственных координат $\mathbf{r} = (x_1, x_2, x_3)$, времени t и неизвестной функции u . В (19) div и ∇ – операторы дивергенции и градиента в декартовых координатах, (\cdot, \cdot) – скалярное произведение в трехмерном пространстве. Предположим, что уравнение (19) сохраняет параболический тип в области $D \times (0, t_{\max}]$. Для этого достаточно равномерной эллиптичности оператора L .

Для уравнения (19) ставится следующая начально-краевая задача:

$$u|_{t=0} = u_0(\mathbf{r}), \quad \mathbf{r} \in D; \quad (21)$$

$$g_1(\mathbf{K}\nabla u + \mathbf{E}u, \mathbf{n}) + g_2 u = g_3, \quad \mathbf{r} \in \partial D, \quad t > 0. \quad (22_1)$$

Здесь $u_0(\mathbf{r})$ – начальное распределение $u(\mathbf{r}, t)$, коэффициенты g_i могут зависеть от u и удовлетворяют условию $g_1^2 + g_2^2 > 0$, $\mathbf{r} \in \partial D$; ∂D – кусочно-гладкая граница области D , \mathbf{n} – вектор внешней нормали к границе. В случае прямоугольной области D вместо условий (22₁) на границе области могут использоваться периодические условия (обозначим их условно (22₂)) или обобщенные дополнительные условия вида

$$\Phi(\mathbf{r}, t; u) = g, \quad \mathbf{r} \in \partial D, \quad t > 0, \quad (22_3)$$

где $\Phi(\mathbf{r}, t; u)$ – линейный или нелинейный функционал от u , а g – функция координат, времени и решения, определенная на границе области D . Примером условий (22₃) могут служить «интегральные условия»:

$$\int_D \phi(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t; u) d\mathbf{r}' = g(\mathbf{r}, t; u), \quad \mathbf{r} \in \partial D, \quad t > 0. \quad (22_4)$$

Основным требованием к задаче (19)-(22) является существование классического решения на временном интервале $(0, t_{\max}]$.

Для дискретизации уравнения (19) и для учёта экспоненциального характера его решения, определяющегося полями \mathbf{E} и \mathbf{F} , преобразуем пространственный оператор L . Для этого введем следующие переменные:

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{E}} &\equiv (\tilde{E}_\alpha)^T = \mathbf{K}^{-1} \mathbf{E}, \quad \tilde{\mathbf{F}} \equiv (\tilde{F}_\alpha)^T = (\mathbf{K}^{-1})^T \mathbf{F}, \\ \mathbf{V} &\equiv (V_\alpha)^T, \quad V_\alpha = G_\alpha u, \quad G_\alpha = \exp \left[\int_{x_\alpha^0}^{x_\alpha} \tilde{E}_\alpha dx \right], \quad \alpha = 1, 2, 3, \\ \tilde{\mathbf{K}} &= \left\{ \begin{array}{c} K_{\alpha\beta} \\ G_\beta \end{array} \right\}_{\alpha, \beta=1, 2, 3}, \quad \mathbf{D} = \left\{ \delta_{\alpha\beta} \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \right\}_{\alpha, \beta=1, 2, 3}, \\ \mathbf{W} &= \tilde{\mathbf{K}} \mathbf{D} \mathbf{V}, \quad \tilde{q} = q + (\mathbf{F}, \tilde{\mathbf{E}}), \end{aligned} \quad (23)$$

где (x_1^0, x_2^0, x_3^0) – произвольная конечная точка пространства, в том числе одна из точек области D , $\delta_{\alpha\beta}$ – δ -функция Кронекера. Тогда оператор (20₁) можно переписать в следующем виде:

$$Lu \equiv \operatorname{div} \mathbf{W} + (\tilde{\mathbf{F}}, \mathbf{W}) - \tilde{q}u \equiv \operatorname{div}(\tilde{\mathbf{K}} \mathbf{D} \mathbf{V}) + (\tilde{\mathbf{F}}, \tilde{\mathbf{K}} \mathbf{D} \mathbf{V}) - \tilde{q}u, \quad (20_2)$$

При разработке сеточных численных методов решения задачи (19)-(22) независимо от пространственной размерности и наличия или отсутствия нелинейности использовался интегро-интерполяционный метод [63], который применяется как на ортогональных декартовых сетках, так и на нерегулярных треугольных и тетраэдральных сетках.

В случае ортогональных сеток аппроксимации уравнений типа «конвекция-диффузия» были известны. Так, в работе А.А. Самарского [60] предложена методика построения консервативных монотонных разностных схем для стационарного и нестационарного вариантов уравнения (19) на декартовой сетке для диагонального

тензора \mathbf{K} и $\mathbf{E} = 0$. Там же предложена и исследована так называемая регуляризованная монотонная схема. В [63] регуляризованная схема обобщена на случай цилиндрически и сферически симметричной геометрии задачи.

В работе Е.И. Голанта [61] рассматривались обобщения регуляризованной схемы А.А. Самарского для диагонального тензора \mathbf{K} и двух вариантов одномерного уравнения (19): когда $\mathbf{E} \equiv 0, \mathbf{F} \neq 0$ и когда $\mathbf{E} \neq 0, \mathbf{F} \equiv 0$. Для этих вариантов были предложены варианты схемы А.А. Самарского в исходном и сопряженном пространствах. Методика исследования схем опиралась на использование принципа максимума для сопряженного разностного уравнения. Было также предложено обобщение построенных схем на произвольную размерность пространства и общий вид сеточного уравнения 2-го порядка.

Подход, разработанный А.А. Самарским и Е.И. Голантом не использовал преобразования (23). В статье Н.В. Кареткиной [62] такое преобразование проводилось. В ней был рассмотрен случай нестационарного уравнения (19) с диагональным тензором \mathbf{K} и $\mathbf{F} \equiv 0$. Предложенные Н.В. Кареткиной разностные схемы фактически являются обобщением на нестационарный и многомерный случай схем экспоненциальной подгонки [64], применяющихся при решении краевых задач для обыкновенных дифференциальных уравнений. Построенные в [62] аппроксимации отличаются от [60, 61] и удовлетворяют лишь слабому принципу максимума. Однако этого достаточно для доказательства существования и единственности разностного решения. Также в [62] был рассмотрен вопрос реализации построенных схем с помощью метода немонотонной прогонки.

В диссертации было предложено естественное объединение схем А.А. Самарского и Н.В. Кареткиной на случай $\mathbf{E} \neq 0, \mathbf{F} \neq 0$ [30]. При этом аппроксимация экспоненциальных членов отличалась от предложенной в [62]. Также было предложено в случае диагонального тензора \mathbf{K} использовать локально-одномерные схемы экспоненциальной подгонки. В работах [12, 34] было показано, что схемы экспоненциальной подгонки можно реализовать и на нерегулярных сетках, например, треугольных и тетраэдральных в присутствии смешанных производных.

Для иллюстрации разработанного численного подхода в случае ортогональных декартовых сеток рассмотрим стационарное уравнение (19) в области $D = \{(x_1, x_2, x_3) : 0 < x_\alpha < 1, \alpha = 1, 2, 3\}$. В качестве граничных условий выберем условия Дирихле. Для аппроксимации задачи на произвольной ортогональной неравномерной сетке $\Omega = \prod_{\alpha=1,2,3} \hat{\omega}_{x_\alpha}$ будем использовать представление оператора L в форме (1.20₂), которое можно записать в виде:

$$Lu \equiv \sum_{\alpha=1,2,3} \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\sum_{\beta=1,2,3} \tilde{K}_{\alpha\beta} \frac{\partial V_\beta}{\partial x_\beta} \right) + \sum_{\alpha=1,2,3} \tilde{F}_\alpha \sum_{\beta=1,2,3} \tilde{K}_{\alpha\beta} \frac{\partial V_\beta}{\partial x_\beta} - \tilde{q}u. \quad (20_3)$$

Используя методику [65] для аппроксимации смешанных производных, методику [60, 61] для аппроксимации недивергентных слагаемых и методику [62] для

аппроксимации экспоненциальных представлений, можно получить сеточную задачу вида

$$L_h y_h = -f_h, \quad \mathbf{r}_h \in \Omega \setminus \partial\Omega, \quad (24)$$

$$y_h = g(\mathbf{r}_h), \quad \mathbf{r}_h \in \partial\Omega. \quad (25)$$

Здесь y_h , f_h и L_h – сеточные аналоги функций u , f и оператора L на Ω , \mathbf{r}_h – узлы сетки, $\partial\Omega$ – граничные узлы сетки. Для L_h на полном 27-ми точечном нерегулярном шаблоне получаем следующее выражение, записанное в безиндексной форме:

$$L_h y_h = \sum_{\alpha=1,2,3} \frac{1}{2} \left[\left(\bar{K}_{h,\alpha\alpha} V_{h,\alpha,\bar{x}_\alpha} \right)_{\hat{x}_\alpha} + \left(\bar{K}_{h,\alpha\alpha} V_{h,\alpha,x_\alpha} \right)_{\bar{x}_\alpha} \right] + \\ + \sum_{\alpha,\beta=1,2,3,\alpha \neq \beta} \frac{1}{4} \left[\left(\bar{K}_{h,\alpha\beta} V_{h,\beta,\bar{x}_\beta} \right)_{\hat{x}_\alpha} + \left(\bar{K}_{h,\alpha\beta} V_{h,\beta,\hat{x}_\beta} \right)_{\bar{x}_\alpha} + \right. \\ \left. + \left(\bar{K}_{h,\alpha\beta} V_{h,\beta,\hat{x}_\beta} \right)_{\hat{x}_\alpha} + \left(\bar{K}_{h,\alpha\beta} V_{h,\beta,\bar{x}_\beta} \right)_{\bar{x}_\alpha} \right] - \tilde{q}_h y_h, \quad (26)$$

где $\tilde{K}_{h,\alpha\beta}$, $V_{h,\alpha} = G_{h,\alpha} y_h$ и \tilde{q}_h – разностные аналоги соответствующих непрерывных функций, $\bar{K}_{h,\alpha\beta} = \chi_\alpha^\pm \tilde{K}_{h,\alpha\beta}$, $\chi_\alpha^\pm = (1 + R_\alpha)^{-1} \pm \hbar_\alpha \tilde{F}_{h,\alpha}^\pm$ – поправки к диагональным компонентам тензора, полученные по аналогии с [60, 61] в которых $R_\alpha = 0.5(\tilde{F}_{h,\alpha}^+ h_\alpha^{(+1)} - \tilde{F}_{h,\alpha}^- h_\alpha)$, $\tilde{F}_{h,\alpha}^\pm = 0.5(\tilde{F}_{h,\alpha} \pm |\tilde{F}_{h,\alpha}|)$. Функции $G_{h,\alpha}$ в отличие от [62] аппроксимируются по формуле трапеций:

$$G_{h,\alpha} \equiv G_{h,\alpha}^{(i_\alpha)} = \exp \left[\sum_{j_\alpha=0}^{i_\alpha} \tilde{E}_{h,\alpha}^{(j_\alpha)} \hbar_\alpha^{(j_\alpha)} \right].$$

Заметим, что в качестве точки (x_1^0, x_2^0, x_3^0) выбрано начало координат.

Заметим, что в случае граничных условий Неймана и Ньютона (входят в (22₁)) уравнение (19) аппроксимируется и на границе со вторым порядком по пространству. Если краевая задача периодическая, то никаких отличий от задачи Дирихле не возникает. Если используются обобщенные граничные условия (22₃), содержащие функционалы, то здесь необходимо аппроксимировать со вторым порядком точности по пространству соответствующие функционалы. Например, если обобщенные граничные условия имеют вид интегралов (22₄), то для их аппроксимации следует использовать квадратурные формулы не ниже второго порядка точности.

Реализация схемы (24)-(26) в линейном случае осуществляется методами решения линейных алгебраических систем. В нелинейном случае для её реализации предлагается использовать метод простой итерации по нелинейности.

Рассмотрим вопрос об аппроксимации, устойчивости и сходимости разностной схемы (24)-(26). Действуя аналогично [65] можно показать, что схема (24)-(26) аппроксимирует стационарную задачу (19)-(22) со вторым порядком. Устойчивость и сходимость схемы (24)-(26) зависит от вида нелинейности. В частности, если дифференциальная задача линейная, и все коэффициенты являются ограниченными

кусочно-непрерывными функциями своих аргументов, то с помощью объединения методик [65] и [61] можно показать, что построенная схема устойчива и сходится к решению дифференциальной задачи со скоростью $O(\hbar_1^2 + \hbar_2^2 + \hbar_3^2)$ в норме $W_2^1(\Omega)$.

Результат можно распространить на случай граничных условий других типов (Неймана, Ньютона, смешанных, периодических, интегральных), и в дальнейшем мы не будем это специально оговаривать. При наличии ограниченной нелинейности коэффициентов дифференциальной задачи результат также остается в силе. Суммируя сказанное можно сформулировать следующую теорему.

Теорема 1. *Разностная схема (24)-(26) устойчива и сходится к точному решению стационарной дифференциальной задачи (19)-(22) со скоростью $O(\hbar_1^2 + \hbar_2^2 + \hbar_3^2)$ в норме $W_2^1(\Omega)$, если выполнены следующие условия:*

- 1) *коэффициенты исходной дифференциальной задачи ограничены и кусочно-непрерывны по совокупности переменных в рассматриваемой области D , а их производные в области непрерывности ограничены;*
- 2) *решение исходной дифференциальной задачи существует, единственно и является достаточно гладким в области D ;*
- 3) *шаги сетки удовлетворяют неравенствам: $0 < h_{\alpha, \max} < h_\alpha^0$, $\alpha = 1, 2, 3$,*

где h_α^0 – положительные константы, независящие от шагов сетки.

Доказательство теоремы проводится с помощью комбинации априорных оценок погрешности разностного решения и погрешности аппроксимации в сеточных нормах $W_2^1(\Omega)$ и $C(\Omega)$ [65]. Ограничения на шаги связаны с тем, что возмущенная квадратичная форма $(\bar{\mathbf{K}}\xi, \xi)$ (где $\bar{\mathbf{K}} = \{K_{\alpha, \beta} / G_\beta\}_{\alpha, \beta=1, 2, 3}$ должна быть равномерно положительно определена.

Далее рассматриваются конкретные применения построенной разностной схемы (которую в дальнейшем будем называть **обобщённой схемой экспоненциальной подгонки** или просто **экспоненциальной схемой**) в пространственно одномерном, нестационарном и многомерном случаях. Для нестационарного случая рассматривается как **нестационарная экспоненциальная схема с весами**, так и **локально одномерные экспоненциальные схемы** в случае нескольких пространственных измерений. Исследуются вопросы их реализации, устойчивости и сходимости. В частности, для схемы с весами формулируется следующая теорема:

Теорема 2. *Обобщённая экспоненциальная разностная схема с весами устойчива и сходится в норме $L_2(\Omega) \times C(\omega_t)$ к точному решению дифференциальной задачи (19)-(22) со скоростью $O(\hbar_1^2 + \hbar_2^2 + \hbar_3^2 + \tau^\gamma)$ (где $\gamma = 1$, если $\sigma \neq 0.5$, и $\gamma = 2$, если $\sigma = 0.5$), если выполнены следующие условия:*

- 1) коэффициенты исходной дифференциальной задачи ограничены и кусочно-непрерывны по совокупности переменных в рассматриваемой области $D \times (0, t_{\max}]$, а их производные в области непрерывности ограничены;
- 2) решение дифференциальной задачи существует, единственно и является достаточно гладким в области $D \times (0, t_{\max}]$;
- 3) шаги сетки удовлетворяют неравенствам:

$$0 < h_{\alpha, \max} < h_{\alpha}^0, \quad \alpha = 1, 2, 3; \quad 0 < \tau < C_{\sigma} \min_{\alpha} h_{\alpha, \min}^{\beta}, \quad \beta = \begin{cases} 1, & \sigma = 1, \\ 2, & 0 \leq \sigma < 1, \end{cases}$$

где σ – неотрицательный вес схемы, h_{α}^0, C_{σ} – положительные константы, независящие от шагов сетки.

Доказательство теоремы в линейном случае и в нелинейном случае для $\sigma = 0$ можно провести методом энергетических неравенств [63, 65]. В нелинейном случае для $\sigma > 0$ необходимо сначала доказать ограниченность разностного решения на новом слое, а затем рассмотреть задачу для погрешности разностного решения с учетом нелинейности. При этом также можно использовать энергетический метод. Такая методика применялась автором, например, в [66].

В случае диагонального тензора \mathbf{K} можно предложить использовать **локально-одномерные схемы экспоненциальной подгонки**, которые строятся аналогично ЛОС А.А. Самарского [63]. При этом можно использовать два варианта – полностью нелинейные и линейные полуявные схемы первого порядка по времени. Если необходимо повысить порядок времени до второго, можно воспользоваться методикой Г.И. Марчука [67] и построить **экспоненциальные схемы двуциклического расщепления** на базе схем Кранка-Николсона. Исследование построенных экспоненциальных схем расщепления опирается на оценки решения в одномерном случае, а реализация проводится методом прогонки. Если схема полностью неявная, потребуются также итерации по нелинейности. Для экспоненциальной ЛОС в диссертации доказана теорема аналогичная теореме 2.

Далее рассматривается вопрос о построении **конечно-объемных схем экспоненциальной подгонки (ЭКО схем)** на нерегулярных треугольных и тетраэдральных сетках. Оказалось, что в этой ситуации применение ЭКО схем осуществимо. Рассмотрим двумерный стационарный вариант уравнения (19) в произвольной замкнутой двумерной области D с кусочно-гладкой границей ∂D . Перейдём к координатам (x, y) . Оператор L в этом случае будет иметь вид

$$\begin{aligned} Lu \equiv & \frac{\partial}{\partial x} \left(\tilde{K}_{xx} \frac{\partial V_x}{\partial x} + \tilde{K}_{xy} \frac{\partial V_y}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\tilde{K}_{yx} \frac{\partial V_x}{\partial x} + \tilde{K}_{yy} \frac{\partial V_y}{\partial y} \right) + \\ & + \tilde{F}_x \left(\tilde{K}_{xx} \frac{\partial V_x}{\partial x} + \tilde{K}_{xy} \frac{\partial V_y}{\partial y} \right) + \tilde{F}_y \left(\tilde{K}_{yx} \frac{\partial V_x}{\partial x} + \tilde{K}_{yy} \frac{\partial V_y}{\partial y} \right) - \tilde{q}u. \end{aligned} \quad (27)$$

Компоненты вектора \mathbf{V} в (31) даются формулами:

$$V_x = G_x u, \quad G_x = \exp \left[\int_{x_0}^x \tilde{E}_x dx' \right]; \quad V_y = G_y u, \quad G_y = \exp \left[\int_{y_0}^y \tilde{E}_y dy' \right]. \quad (28)$$

Граничное условие (например, 2-го или 3-го рода) зададим с помощью вектора потока \mathbf{W} с компонентами

$$W_x = \tilde{K}_{xx} \frac{\partial V_x}{\partial x} + \tilde{K}_{xy} \frac{\partial V_y}{\partial y}, \quad W_y = \tilde{K}_{yx} \frac{\partial V_x}{\partial x} + \tilde{K}_{yy} \frac{\partial V_y}{\partial y},$$

в виде

$$(\mathbf{W}, \mathbf{n}) = W_n, \quad (x, y) \in \partial D. \quad (29)$$

Здесь W_n – некоторая функция, зависящая от координат и решения u .

Перейдем к описанию ЭКО схемы на треугольной сетке, предполагая, что область D может иметь произвольно сложную форму. Пусть в D задана сетка $\bar{\omega}_p = \{P_i = (x_i, y_i), i = 1, \dots, N\}$, содержащая как внутренние точки области D , так и точки ее границы ∂D . Множеством ω_p обозначим все внутренние точки $\bar{\omega}_p$. На $\bar{\omega}_p$ построена триангуляция $T(\bar{\omega}_p) = \{T_m = \Delta(P_{i_m}, P_{j_m}, P_{k_m}), P_{i_m}, P_{j_m}, P_{k_m} \in \omega_p, m = 1, \dots, M\}$, про которую известно следующее:

- 1) $T(\bar{\omega}_p)$ содержит все узлы $\bar{\omega}_p$;
- 2) образующие $T(\bar{\omega}_p)$ треугольники T_m имеют ненулевую площадь и пересекаются не более чем по образующим их вершинам или ребрам;
- 3) объединение треугольников $D_h = \bigcup_{m=1}^M T_m$ имеет ту же связность, что и область D ;
- 4) отношение площадей $\gamma = S(D_h) / S(D) = 1 - \varepsilon$ ($0 \leq \varepsilon < 1$).
- 5) в случае $\varepsilon > 0$ величина γ стремится к 1 при бесконечном измельчении $T(\bar{\omega}_p)$ с учетом криволинейности границы;
- 6) центр масс каждого треугольника проектируется на каждую его сторону.

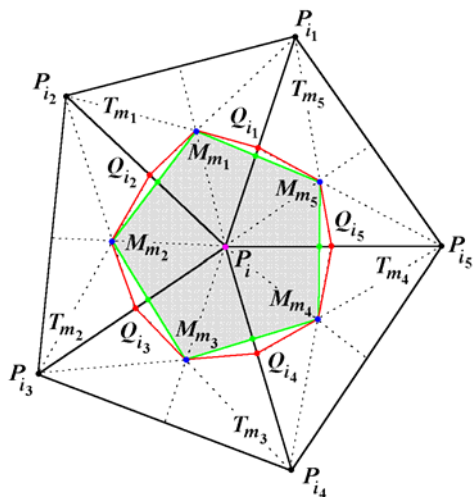
Алгоритм построения такой сетки рассмотрен, например, в [68].

Введем множество граничных узлов $\partial \bar{\omega}_p = \bar{\omega}_p \setminus \omega_p$, а также граничных ребер треугольников $E(\bar{\omega}_p)$. Количество граничных ребер обозначим L . Введем дуальную к $\bar{\omega}_p$ сетку $\bar{\omega}_v = \{V_i = V(P_i), i = 1, \dots, N\}$, состоящую из контрольных объемов. Для этого в каждой точке $P_i \in \bar{\omega}_p$ определим множество всех треугольников, вершинами которых она является, $H_i = \{T_m \in T(\bar{\omega}_p) : P_i \in T_m\}$, и назовем его шаблоном в точке P_i . Пусть количество точек в шаблоне равно $N_i + 1$ (включая точку P_i), а количество треугольников равно M_i . Пронумеруем точки и треугольники в смежном порядке в направлении против часовой стрелки: $P_i, P_{i_1}, \dots, P_{i_{N_i}}, T_{m_1}, \dots, T_{m_{M_i}}$. При этом каждый

треугольник T_{m_j} образован точками P_i, P_j, P_{i+j} (см. рис. 1), которые обозначим как $P_i, P_{m_j}^{(-)}, P_{m_j}^{(+)}$ (см. рис. 2). Если точка P_i – внутренняя, то шаблон H_i полный, и $M_i = N_i$, при этом $N_i \geq 3$. Если точка P_i – граничная, то шаблон H_i неполный, и $M_i < N_i$, при этом $N_i \geq 2$.

В каждом из треугольников шаблона определим точку пересечения медиан (центр масс треугольника) M_{m_j} ($j = 1, \dots, M_i$). Соединим эти точки последовательно и получим замкнутую ломаную L_i , окружающую точку P_i . Фигура, ограниченная ломаной L_i (зеленые линии на рис. 1), составляет контрольный объем V_i (заштрихованная область на рис. 1) в точке P_i с площадью $|V_i|$. Если P_i – граничная, то ломаная L_i замыкается через проекции точек M_j на соответствующие граничные ребра и саму точку P_i (см. рис. 1б). Последнее можно сделать ввиду выполнения условия б).

а)



б)

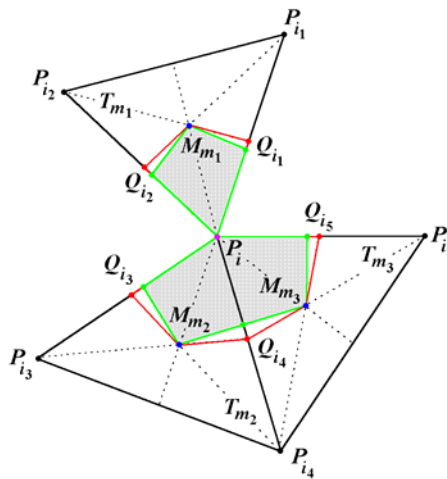


Рисунок 1. Схема определения медианного и барицентрического контрольных объёмов для внутренних (а) и граничных точек (б). Синие точки – центры масс треугольников, красные – середины ребер треугольников, зеленые – пересечения ребер и отрезков, соединяющих смежные центры масс. Зелеными линиями и штриховкой выделен медианный объём, красными линиями – барицентрический объём.

Введенный таким образом контрольный объём называется **медианным контрольным объёмом**. Он всегда существует, является выпуклым и пересекается с соседними объёмами только по границе. Недостаток медианных контрольных объёмов – несимметричная аппроксимация самосопряженных дифференциальных операторов. Поэтому далее используется **барицентрический контрольный объём**. Он отличается от медианного тем, что все звенья ломаных разбиваются на две части, каждая из которых лежит на медиане соответствующего треугольника. Таким

образом, новая ломаная \tilde{L}_i состоит из $2M_i$ звеньев (отмечены красным на рис. 1), каждое из которых соединяет центр масс M_{m_j} (синие точки на рис. 1) одного из треугольников с серединой Q_{i_k} (красные точки на рис. 1) одной из сторон этого треугольника.

Рассмотрим подробнее составные части барицентрического контрольного объема, представленные на рис. 1, 2. Как видно из рисунков, пересечение контрольного объема V_i и любого треугольника T_{m_j} шаблона H_i дает четырехугольник $\tilde{T}_{m_j} \equiv V_i \cap T_{m_j} = \tilde{T}_{m_j}^{(-)} \cup \tilde{T}_{m_j}^{(+)}$, состоящий из двух смежных треугольных частей $\tilde{T}_{m_j}^{(-)}$ и $\tilde{T}_{m_j}^{(+)}$.

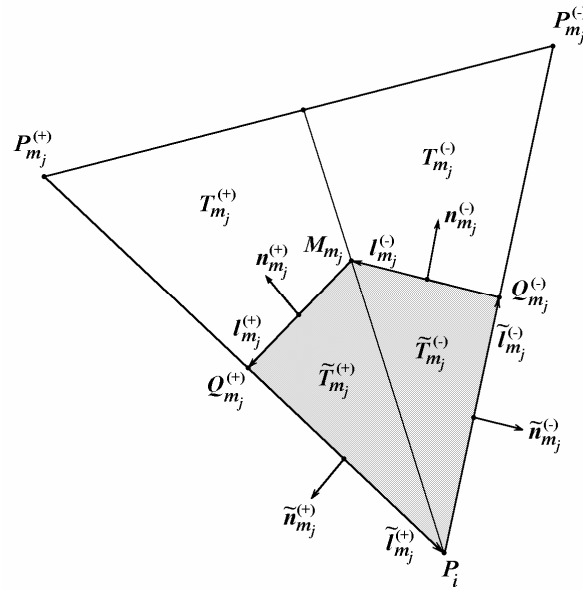


Рисунок 2. Составные части барицентрического контрольного объема в треугольнике T_{m_j} и направления нормалей и конормалей на их границах.

В дальнейшем используются обозначения: $P_i = (x_i, y_i)$, $P_{m_j}^{(-)} = (x_{m_j}^{(-)}, y_{m_j}^{(-)})$, $P_{m_j}^{(+)} = (x_{m_j}^{(+)}, y_{m_j}^{(+)})$ – вершины треугольника T_{m_j} , упорядоченные в направлении против часовой стрелки; $Q_{m_j}^{(-)}, Q_{m_j}^{(+)}$ – середины сторон, исходящих из точки P_i ; S_{m_j} , $\tilde{S}_{m_j}^{(\pm)}$ и \tilde{S}_{m_j} – площади T_{m_j} , $\tilde{T}_{m_j}^{(\pm)}$ и \tilde{T}_{m_j} (см. рис. 2). На границе \tilde{T}_{m_j} , состоящей из четырех направленных отрезков

$$\tilde{\mathbf{l}}_{m_j}^{(-)} = \overrightarrow{P_i Q_{m_j}^{(-)}}, \quad \mathbf{l}_{m_j}^{(-)} = \overrightarrow{Q_{m_j}^{(-)} M_{m_j}}, \quad \mathbf{l}_{m_j}^{(+)} = \overrightarrow{M_{m_j} Q_{m_j}^{(+)}}, \quad \tilde{\mathbf{l}}_{m_j}^{(+)} = \overrightarrow{Q_{m_j}^{(+)} P_i},$$

определим векторы конормалей и нормалей к этим отрезкам по формулам:

$$\mathbf{v}_{m_j}^{(\pm)} = \mathbf{l}_{m_j}^{(\pm)} / |\mathbf{l}_{m_j}^{(\pm)}|, \quad \tilde{\mathbf{v}}_{m_j}^{(\pm)} = \tilde{\mathbf{l}}_{m_j}^{(\pm)} / |\tilde{\mathbf{l}}_{m_j}^{(\pm)}|, \quad \mathbf{n}_{m_j}^{(\pm)} = \Theta \mathbf{v}_{m_j}^{(\pm)}, \quad \tilde{\mathbf{n}}_{m_j}^{(\pm)} = \Theta \tilde{\mathbf{v}}_{m_j}^{(\pm)},$$

где Θ – оператор поворота на 90 градусов по часовой стрелке. Также удобно использовать векторы

$$\Delta P_{m_j}^{(\pm)} = \overrightarrow{P_i P_{m_j}^{(\pm)}} = \left(x_{m_j}^{(\pm)} - x_i, y_{m_j}^{(\pm)} - y_i \right)^T = \left(\Delta x_{m_j}^{(\pm)}, \Delta y_{m_j}^{(\pm)} \right)^T,$$

$$\Delta Q_{m_j}^{(\pm)} = \overrightarrow{P_i Q_{m_j}^{(\pm)}} = \frac{1}{2} \Delta P_{m_j}^{(\pm)} = \frac{1}{2} \left(\Delta x_{m_j}^{(\pm)}, \Delta y_{m_j}^{(\pm)} \right)^T,$$

$$\Delta M_{m_j} = \overrightarrow{P_i M_{m_j}} = \frac{1}{3} \left(\Delta x_{m_j}^{(+)} + \Delta x_{m_j}^{(-)}, \Delta y_{m_j}^{(+)} + \Delta y_{m_j}^{(-)} \right)^T,$$

и следующие соотношения:

$$\tilde{\mathbf{I}}_{m_j}^{(-)} = \Delta Q_{m_j}^{(-)} = \frac{1}{2} \left(\Delta x_{m_j}^{(-)}, \Delta y_{m_j}^{(-)} \right)^T, \quad \tilde{\mathbf{I}}_{m_j}^{(+)} = -\Delta Q_{m_j}^{(+)} = -\frac{1}{2} \left(\Delta x_{m_j}^{(+)}, \Delta y_{m_j}^{(+)} \right)^T,$$

$$\mathbf{I}_{m_j}^{(-)} = \Delta M_{m_j} - \Delta Q_{m_j}^{(-)} = \frac{1}{6} \left(2\Delta x_{m_j}^{(+)} - \Delta x_{m_j}^{(-)}, 2\Delta y_{m_j}^{(+)} - \Delta y_{m_j}^{(-)} \right)^T,$$

$$\mathbf{I}_{m_j}^{(+)} = \Delta Q_{m_j}^{(+)} - \Delta M_{m_j} = \frac{1}{6} \left(\Delta x_{m_j}^{(+)} - 2\Delta x_{m_j}^{(-)}, \Delta y_{m_j}^{(+)} - 2\Delta y_{m_j}^{(-)} \right)^T,$$

$$S_{m_j} = \frac{1}{2} \left[\Delta P_{m_j}^{(-)} \times \Delta P_{m_j}^{(+)} \right] = \frac{1}{2} \left(\Delta x_{m_j}^{(-)} \Delta y_{m_j}^{(+)} - \Delta x_{m_j}^{(+)} \Delta y_{m_j}^{(-)} \right),$$

$$|V_i| = \sum_{j=1}^{M_i} \tilde{S}_{m_j}, \quad \tilde{S}_{m_j}^{(-)} = \frac{1}{2} \left[\Delta Q_{m_j}^{(-)} \times \Delta M_{m_j} \right] = \frac{1}{6} S_{m_j},$$

$$\tilde{S}_{m_j}^{(+)} = \frac{1}{2} \left[\Delta M_{m_j} \times \Delta Q_{m_j}^{(+)} \right] = \frac{1}{6} S_{m_j}, \quad \tilde{S}_{m_j} = \tilde{S}_{m_j}^{(-)} + \tilde{S}_{m_j}^{(+)} = \frac{1}{3} S_{m_j}.$$

Также для каждого треугольника $T_m \in T(\bar{\omega}_p)$ удобно ввести независимую локальную нумерацию вершин, рёбер и их длин, а также обозначения сеточной функции в вершинах:

$$P_m^{(\alpha)} = \left(x_m^{(\alpha)}, y_m^{(\alpha)} \right), \quad \alpha = 1, 2, 3;$$

$$\mathbf{I}_m^{(\alpha\alpha+1)} \equiv \overrightarrow{P_m^{(\alpha)} P_m^{(\alpha+1)}} \equiv \left(x_m^{(\alpha+1)} - x_m^{(\alpha)}, y_m^{(\alpha+1)} - y_m^{(\alpha)} \right)^T \equiv \left(\Delta x_m^{(\alpha\alpha+1)}, \Delta y_m^{(\alpha\alpha+1)} \right)^T;$$

$$l_m^{(\alpha\alpha+1)} \equiv |\mathbf{I}_m^{(\alpha\alpha+1)}| = \sqrt{\left(x_m^{(\alpha+1)} - x_m^{(\alpha)} \right)^2 + \left(y_m^{(\alpha+1)} - y_m^{(\alpha)} \right)^2},$$

$$l_{\min} = \min_{m, \alpha} l_m^{(\alpha\alpha+1)}, \quad l_{\max} = \max_{m, \alpha} l_m^{(\alpha\alpha+1)};$$

$$u\left(P_m^{(\alpha)}\right) = u\left(x_m^{(\alpha)}, y_m^{(\alpha)}\right) \equiv u_m^{(\alpha)}, \quad \alpha = 1, 2, 3.$$

Нумерация вершин производится в направлении против часовой стрелки. Увеличение параметра α на единицу производится циклически в рамках множества $\{1, 2, 3\}$, то есть $3 + 1 = 1$.

Методика построения конечно-объёмной схемы состоит в том, что исходное уравнение разделяется на два с помощью введения вектора потока \mathbf{W} , и каждое из них аппроксимируется отдельно путем интегрирования по элементарному объёму и интерполяции подинтегральных функций, например, многочленами Лагранжа. Такой подход применяется обычно для построения разностных схем на ортогональных четырехугольных сетках [63, 69]. При этом искомая функция u задается внутри

четырёхугольной ячейки, а значения вектора потока \mathbf{W} определяются на сторонах ячейки. В диссертации предлагается использовать эту же методику для построения схем на нерегулярных треугольных и тетраэдральных сетках. Причем, как и в [70], предлагается значения неизвестной функции искать в узлах сетки $\bar{\omega}_p$, а потоки аппроксимировать специальным образом по этим значениям. Такой подход имеет определенное преимущество, в том числе позволяет решать задачу с граничными условиями любого типа (1-го, 2-го, 3-го рода или смешанными, периодическими и функциональными).

Выпишем окончательный вид *ЭКО* схемы на *треугольной сетке*:

$$L_h[U_h]U_i = -\bar{f}_i, \quad i = 1, \dots, N, \quad (30_1)$$

$$L_h[U_h]U_i \equiv \frac{1}{|V_i|} \sum_{j=1}^{M_i} \left[\left(\mathbf{W}_{m_j}, \chi_{m_j}^{(-)} \Theta \mathbf{l}_{m_j}^{(-)} + \chi_{m_j}^{(+)} \Theta \mathbf{l}_{m_j}^{(+)} \right) + \gamma_{m_j}^{(-)} + \gamma_{m_j}^{(+)} \right] - \bar{q}_i U_i, \quad (30_2)$$

$$W_{x,m_j} = \frac{a_{m_j}^{(yy)} b_{m_j}^{(x)} - a_{m_j}^{(xy)} b_{m_j}^{(y)}}{a_{m_j}^{(xx)} a_{m_j}^{(yy)} - a_{m_j}^{(xy)} a_{m_j}^{(yx)}}, \quad W_{y,m_j} = \frac{b_{m_j}^{(y)} a_{m_j}^{(xx)} - b_{m_j}^{(x)} a_{m_j}^{(yx)}}{a_{m_j}^{(xx)} a_{m_j}^{(yy)} - a_{m_j}^{(xy)} a_{m_j}^{(yx)}}, \quad (30_3)$$

$$\begin{aligned} a_{m_j}^{(xx)} &= +\frac{1}{3} \left[\left(\frac{K_{yy} \bar{G}_x}{\Delta} \right)_i + \left(\frac{K_{yy} \bar{G}_x}{\Delta} \right)_{m_j}^{(-)} + \left(\frac{K_{yy} \bar{G}_x}{\Delta} \right)_{m_j}^{(+)} \right], \\ a_{m_j}^{(xy)} &= -\frac{1}{3} \left[\left(\frac{K_{xy} \bar{G}_x}{\Delta} \right)_i + \left(\frac{K_{xy} \bar{G}_x}{\Delta} \right)_{m_j}^{(-)} + \left(\frac{K_{xy} \bar{G}_x}{\Delta} \right)_{m_j}^{(+)} \right], \\ a_{m_j}^{(yx)} &= -\frac{1}{3} \left[\left(\frac{K_{yx} \bar{G}_y}{\Delta} \right)_i + \left(\frac{K_{yx} \bar{G}_y}{\Delta} \right)_{m_j}^{(-)} + \left(\frac{K_{yx} \bar{G}_y}{\Delta} \right)_{m_j}^{(+)} \right], \\ a_{m_j}^{(yy)} &= +\frac{1}{3} \left[\left(\frac{K_{xx} \bar{G}_y}{\Delta} \right)_i + \left(\frac{K_{xx} \bar{G}_y}{\Delta} \right)_{m_j}^{(-)} + \left(\frac{K_{xx} \bar{G}_y}{\Delta} \right)_{m_j}^{(+)} \right], \end{aligned} \quad (30_4)$$

$$\Delta = K_{xx} K_{yy} - K_{xy} K_{yx},$$

$$\begin{aligned} b_{m_j}^{(x)} &= +\frac{1}{2S_{m_j}} \left[\begin{aligned} &\left(\bar{G}_{x,m_j}^{(-)} U_{m_j}^{(-)} + \bar{G}_{x,i} U_i \right) \Delta y_{m_j}^{(-)} + \\ &+ \left(\bar{G}_{x,m_j}^{(+)} U_{m_j}^{(+)} + \bar{G}_{x,m_j}^{(-)} U_{m_j}^{(-)} \right) \left(\Delta y_{m_j}^{(+)} - \Delta y_{m_j}^{(-)} \right) - \\ &- \left(\bar{G}_{x,i} U_i + \bar{G}_{x,m_j}^{(+)} U_{m_j}^{(+)} \right) \Delta y_{m_j}^{(+)} \end{aligned} \right], \\ b_{m_j}^{(y)} &= -\frac{1}{2S_{m_j}} \left[\begin{aligned} &\left(\bar{G}_{y,m_j}^{(-)} U_{m_j}^{(-)} + \bar{G}_{y,i} U_i \right) \Delta x_{m_j}^{(-)} + \\ &+ \left(\bar{G}_{y,m_j}^{(+)} U_{m_j}^{(+)} + \bar{G}_{y,m_j}^{(-)} U_{m_j}^{(-)} \right) \left(\Delta x_{m_j}^{(+)} - \Delta x_{m_j}^{(-)} \right) - \\ &- \left(\bar{G}_{y,i} U_i + \bar{G}_{y,m_j}^{(+)} U_{m_j}^{(+)} \right) \Delta x_{m_j}^{(+)} \end{aligned} \right]. \end{aligned} \quad (30_5)$$

$$\chi_{m_j}^{(\pm)} = \frac{1}{1 + |\delta_{m_j}^{(\pm)}|} + \left(|\delta_{m_j}^{(\pm)}| + \delta_{m_j}^{(\pm)} \right), \quad \delta_{m_j}^{(\pm)} = \frac{\tilde{S}_{m_j} \left(\tilde{F}_{x,i} n_{y,m_j}^{(\pm)} - \tilde{F}_{y,i} n_{x,m_j}^{(\pm)} \right)}{|\mathbf{I}_{m_j}^{(\pm)}| \left(n_{x,m_j}^{(-)} n_{y,m_j}^{(+)} - n_{y,m_j}^{(-)} n_{x,m_j}^{(+)} \right)}, \quad (30_6)$$

$$\gamma_{m_j}^{(\pm)} = \begin{cases} \frac{1}{2} \left[W_n(P_i) + W_n(Q_{m_j}^{(\pm)}) \right] |\tilde{\mathbf{I}}_{m_j}^{(\pm)}|, & P_i, P_{m_j}^{(\pm)} \in \partial D, \\ 0, & P_i \vee P_{m_j}^{(\pm)} \notin \partial D, \end{cases} \quad (30_7)$$

$$\bar{G}_{x,i} = 1, \quad \bar{G}_{x,m_j}^{(\pm)} = \exp \left[\frac{1}{2} \left(\tilde{E}_{x,i} + \tilde{E}_{x,m_j}^{(\pm)} \right) \Delta x_{m_j}^{(\pm)} \right], \quad (30_8)$$

$$\bar{G}_{y,i} = 1, \quad \bar{G}_{y,m_j}^{(\pm)} = \exp \left[\frac{1}{2} \left(\tilde{E}_{y,i} + \tilde{E}_{y,m_j}^{(\pm)} \right) \Delta y_{m_j}^{(\pm)} \right],$$

$$\bar{q}_i = \tilde{q}_i + \frac{1}{|V_i|} \sum_{j=1}^{M_i} \frac{\theta}{3} \left(\Delta \tilde{q}_{m_j}^{(-)} + \Delta \tilde{q}_{m_j}^{(+)} \right) \tilde{S}_{m_j},$$

$$\bar{U}_i = U_i + \frac{1}{|V_i|} \sum_{j=1}^{M_i} \left(\alpha_{m_j}^{(-)} \Delta U_{m_j}^{(-)} + \alpha_{m_j}^{(+)} \Delta U_{m_j}^{(+)} \right), \quad (30_9)$$

$$\bar{f}_i = f_i + \frac{1}{|V_i|} \sum_{j=1}^{M_i} \left(\alpha_{m_j}^{(-)} \Delta f_{m_j}^{(-)} + \alpha_{m_j}^{(+)} \Delta f_{m_j}^{(+)} \right),$$

$$\alpha_{m_j}^{(-)} = \frac{7\theta}{36} \tilde{S}_{m_j}, \quad \alpha_{m_j}^{(+)} = \frac{7\theta}{36} \tilde{S}_{m_j}, \quad \theta = 0 \vee 1.$$

Сделаем замечание об аппроксимации различных типов граничных условий. Во-первых, условие (29) включает в себя условие Неймана $W_n = 0$. В этом случае величины $\gamma_{m_j}^{(\pm)} = 0$ во всех точках сетки. Это же справедливо для условий Дирихле, поскольку уравнения (30₁) рассматриваются только во внутренних точках сетки. Во-вторых, (29) может быть условием Ньютона, если $W_n = -\eta u$. Тогда величины $\gamma_{m_j}^{(\pm)} = -\frac{1}{2} \left[(\eta U)_i + \frac{1}{2} \left[(\eta U)_i + (\eta U)_{m_j}^{(\pm)} \right] \right] |\tilde{\mathbf{I}}_{m_j}^{(\pm)}|$. В случае условий смешанного типа, на каждой части границы получаем соответствующее типу выражение для $\gamma_{m_j}^{(\pm)}$. В-третьих, при аппроксимации интегральных граничных условий величины $\gamma_{m_j}^{(\pm)} = \sum_{k=1}^N C_{m_j,k}^{(\pm)} U_k$, то есть выражаются через значения искомой функции в любых точках сетки (нелокальная аппроксимация). Похожая ситуация реализуется в случае периодических граничных условий.

Также отметим, что в нелинейном случае для реализации схемы (30) следует использовать итерационный процесс по нелинейности. Каждая его итерация реализуется с помощью решения системы линейных алгебраических уравнений с разреженной матрицей нерегулярной структуры.

Порядок аппроксимации схемы (30) зависит от параметра θ и качества триангуляции. При $\theta = 0$ в случае произвольной треугольной сетки получаем ошибку порядка $O(\bar{l})$, где \bar{l} – величина наибольшего ребра треугольников ($\bar{l} \equiv l_{\max}$), входящих в шаблон H_i . Если точка P_i совпадает с центром масс контрольного объема V_i , а многоугольник V_i – правильный, то порядок аппроксимации повышается до $O(\bar{l}^2)$. Также, порядок аппроксимации можно считать приближенно вторым, если положение точки P_i мало отличается от центра масс, а V_i – почти правильный многоугольник. В случае $\theta = 1$ схема имеет второй порядок аппроксимации независимо от качества триангуляции.

Схема (30) в случае диагонального тензора \mathbf{K} и $\mathbf{F} \equiv 0, \mathbf{E} \equiv 0$ переходит в полный аналог однородной консервативной схемы А.А. Самарского. В случае, если $\mathbf{F} \neq 0$, получается аналог регуляризированной схемы А.А. Самарского. Если, наоборот, $\mathbf{E} \neq 0$, то получаем аналог схемы Н.В. Кареткиной. Исследования схемы (30) показали, что в случае $\mathbf{E} \equiv 0$ для сеточного оператора $L_h[U_h]$, заданного во внутренних точках сетки, выполняется условный принцип максимума. В случае $\mathbf{E} \neq 0$ удаётся доказать лишь условный принцип максимума в слабом смысле.

По аналогии со случаем ортогональной сетки (Теорема 2) далее доказывается устойчивость и сходимость схемы (30) в норме пространства $W_2^1(\bar{\omega}_P)$. Доказательство проводится на основе априорных оценок в комбинированной норме.

В случае нестационарной дифференциальной задачи рассматривается схема с весами. Аппроксимации оператора L_h и f_h совпадают с (30) при $\theta = 0$. Порядок аппроксимации схемы по пространству можно условно считать вторым. Порядок аппроксимации по времени зависит от веса σ . Как обычно, рассматриваются три варианта схемы: явная, неявная и симметричная. Схема с весами при любом типе граничных условий является консервативной и удовлетворяет принципу максимума (в сильном или слабом смысле) на каждом слое по времени. Сходимость схемы к точному решению задачи гарантирует соответствующая теорема (см. также [12]).

Далее в диссертации рассматривается случай криволинейной трёхмерной области, которая дискретизируется с помощью нерегулярной тетраэдральной сетки. В этом случае по аналогии с выше изложенным строятся стационарные и нестационарные экспоненциальные схемы на тетраэдральной сетке. Проводится краткий анализ аппроксимации, устойчивости и сходимости этих схем (см. [34]).

В п. 1.3 рассматриваются численные методы решения уравнений Фоккера-Планка и Шрёдингера на ортогональных сетках. В первом случае рассматривается уравнение (12), в основе которого лежит обыкновенное дифференциальное уравнение 2-го порядка с интегральными коэффициентами, зависящими от решения. Для его численного решения предложено применить метод конечных разностей на неравномерной сетке по энергетической координате ε . Структура уравнения

позволяет построить нелинейную схему экспоненциальной подгонки, рассмотренную выше. Ввиду нелинейности краевой задачи (12)-(13) необходимо использование итерационного процесса, для чего предложено использовать метод Ньютона, поскольку он существенно ускоряет процедуру решения.

Для решения задачи линейного туннельного транспорта (14)-(16) предложено несколько подходов. Первый подход предлагается для случая, когда уравнение (14) не является сингулярным ($\gamma^2 = \frac{2mL^2}{\hbar^2} \max(eV_{\max}, \varepsilon_{\max}) \leq 1$) и конкретный вид волновых функций не используется, а вычисляется лишь коэффициент туннелирования (17) в диапазоне энергий $(0, \varepsilon_{\max})$. В этой ситуации применяется **метод передаточных матриц** (МПМ) [71, 72]: вся область туннелирования $[0, L]$ покрывается сегментами одинаковой или различной длины, на каждом из которых потенциальный профиль $V(x)$ аппроксимируется либо константой $\bar{V}_j = 0.5(V_j + V_{j+1})$, либо линейной функцией $V_j + (x - x_j)(V_{j+1} - V_j)$. На каждом сегменте уравнение (14) решается аналитически: его решениями являются либо полиномы второго порядка, либо функции Эйри. Решения на соседних сегментах сшиваются с помощью условий сопряжения типа (16). Такая методика позволяет быстро рассчитать коэффициенты прохождения T и отражения R , а также коэффициент туннелирования D , по произведению передаточных матриц Q_j . Данный подход однако имеет недостатки. Если используется кусочно постоянная аппроксимация барьера, то возникают мелкомасштабные осцилляции решения (что приводит к ряби на кривой коэффициента туннелирования), а некоторые передаточные матрицы могут быть вырожденными (при $\varepsilon = \bar{V}_j$). Если же используется кусочно-линейная аппроксимация барьера, то возникают проблемы с вычислением функций Эйри, вычисление которых имеет высокую арифметическую сложность, а погрешность тем больше, чем больше угол наклона аппроксимирующей прямой.

В диссертации предложено объединить оба варианта МПМ так, чтобы на сегментах, где угол наклона кривой барьера мал (порядка нескольких градусов) или велик (близок к 90°) использовать косочно-постоянную аппроксимацию нижним или верхним значением потенциала, а в остальных случаях использовать кусочно-линейное приближение. Данный подход был реализован и подтвердил свою эффективность [33, 14]. Однако ещё более универсальным оказался МПМ на основе симметричной схемы Адамса. Для этого уравнение (14) было приведено к системе уравнений 1-го порядка

$$\frac{d\psi}{dx} = p, \quad \frac{dp}{dx} = -a(x)\psi, \quad a(x) \equiv \gamma^2 [E - V(x)]. \quad (31)$$

Применяя к (31) схему Адамса на равномерной сетке, были получены рекуррентные соотношения определения передаточных матриц

$$\begin{pmatrix} 1 & -0.5h \\ 0.5ha_{j+1/2} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{j+1} \\ p_{j+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0.5h \\ -0.5ha_{j+1/2} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_j \\ p_j \end{pmatrix} \Leftrightarrow \begin{pmatrix} \psi_{j+1} \\ p_{j+1} \end{pmatrix} = Q_{j+1} \begin{pmatrix} \psi_j \\ p_j \end{pmatrix}$$

и связь между значениями неизвестных функций в граничных точках:

$$\begin{pmatrix} \psi_N \\ p_N \end{pmatrix} = \prod_{j=1}^N Q_j \cdot \begin{pmatrix} \psi_0 \\ p_0 \end{pmatrix} = Q \begin{pmatrix} \psi_0 \\ p_0 \end{pmatrix} \Leftrightarrow \begin{pmatrix} T \\ ik_L T \end{pmatrix} = Q \begin{pmatrix} 1+R \\ ik_R(1-R) \end{pmatrix}.$$

Второй подход предложен для случая, когда безразмерное уравнение (14) является сингулярным: $\gamma^2 \gg 1$. В этой ситуации метод передаточных матриц даёт ошибочные результаты ввиду быстрого накопления ошибок округления. Поэтому используется прямое решение (например, методом комплексной прогонки) следующей безразмерной краевой задачи:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \gamma^2 a(x) \psi &= 0, \quad 0 < x < 1, \\ \frac{\partial \psi}{\partial x}(0) &= i\gamma_L(2 - \psi(0)), \quad \frac{\partial \psi}{\partial x}(1) = i\gamma_R \psi(1); \\ R &= \psi(0) - 1, \quad T = \psi(1) e^{-i\gamma_R}. \end{aligned} \quad (32)$$

(Здесь $\gamma_L = k_L L$, $\gamma_R = k_R L$). Предложенный подход даёт правильные результаты, если выполняется естественное условие на шаг сетки: $h\gamma \ll 1$.

Для решения одномерного нелинейного уравнения Шрёдингера типа (18) также формулируется краевая задача типа (32). Однако суммарный оператор является нелокально нелинейным, а его матрица полностью заполненной. Поэтому базовым алгоритмом решения является итерационный процесс по нелинейности, а на каждой итерации применяется комплексное LU-разложение. Другие детали метода изложены в гл. 5.

В п. 1.4 рассматривается проблема некорректности одномерных краевых задач для стационарных уравнений Фоккера-Планка и Шрёдингера. Дифференциальная задача в этих случаях часто не является корректной ввиду нелинейности интегрального закона Ома. Применительно к задачам туннелирования это означает, что если на внешних электродах структуры задано напряжение больше критического, то развивается неустойчивость, при которой прохождение электронных волн через структуру осуществляется несколькими способами, то есть имеет место неоднозначность решения. Один из возможных путей разрешения этой проблемы состоит в использовании предложенного в диссертации геометрического метода.

Как известно, в пространственно одномерных системах величина тока не зависит от пространственной координаты. Следствием этого является непрерывность вольт-амперной характеристики (ВАХ) системы, в том числе для бистабильной или мультистабильной одномерной системы. В последнем случае на ВАХ имеются участки S и/или N типа (см. рис. 3а). Каждой точке ВАХ соответствует стабильное или нестабильное состояние системы. Для нахождения всех решений для заданного

значения напряжения (или тока) необходимо провести дополнительную линию нагрузки и локализовать точки пересечения. Другими словами, для поиска всех ветвей решения математической задачи при заданном значении параметра (напряжения или тока), необходимо задать дополнительное условие, выделяющее однозначно каждую из точек пересечения ВАХ с линией нагрузки. Для известной формы ВАХ проведение линии нагрузки – простая задача. Если же исходная задача нелинейна, и ее ВАХ неизвестна (то есть определяется только вместе с решением), то проведение линии нагрузки становится большой проблемой.

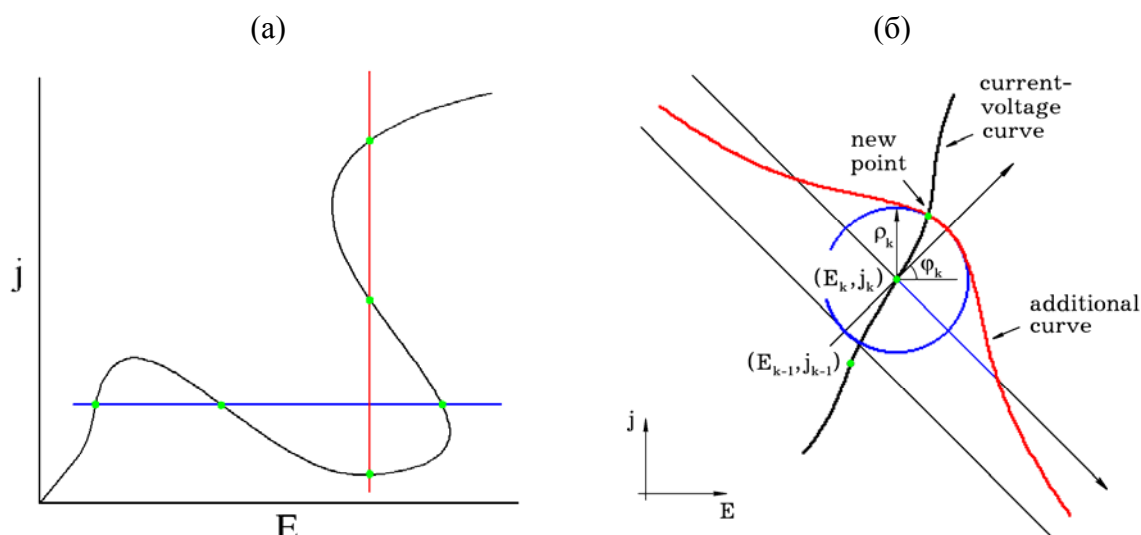


Рисунок 3. Пример нелинейной вольт-амперной характеристики (черная кривая) и проведения к ней линий нагрузки (синяя и красная прямые) (а) и иллюстрация применения геометрического метода (б). Зелеными точками помечены различные ветви решения.

В диссертации предлагается при решении задачи в области неустойчивости добавлять к основной системе уравнений дополнительное, описывающее линию нагрузки и выделяющее уникальную ветвь решения. Для этого необходимо, чтобы линия нагрузки пересекала ВАХ только в одной точке. Обеспечить выполнение этого условия на всей плоскости невозможно. Однако если рассмотреть малую окрестность вблизи некоторой точки ВАХ, такое проведение линии нагрузки возможно. В варианте предложенного метода используется следующая процедура задания линии нагрузки. ВАХ по определению задается интегральным соотношением

$$j = \sigma E, \tag{33}$$

где j и σ в общем случае могут быть функционалами. Вычисления ВАХ начинаются с точки равновесия ($E_0=0, j_0=0$), в которой решение исходной задачи известно или легко вычисляется. Обычно, равновесное (основное) состояние электронной системы единственно. Начальная часть ВАХ вблизи точки равновесия близка к линейной функции (всегда можно выбрать такую малую окрестность, где это справедливо). Поэтому, нахождение нескольких следующих точек на кривой ВАХ с малым шагом по обеим координатам (E, j) не сложно.

Будем считать, что последней вычисленной точкой была (E_k, j_k) . При этом решение задачи оставалось единственным. В плоскости (E, j) перейдем к локальной полярной системе координат (ρ, φ) с центром в точке (E_k, j_k) :

$$E = E_k + \rho \cos(\varphi - \varphi_k), \quad j = j_k + \rho \sin(\varphi - \varphi_k). \quad (34)$$

Здесь ρ – расстояние, отсчитываемое от точки (E_k, j_k) , φ – угол, отсчитываемый против часовой стрелки от оси $(0, E)$. Для вычисления новой точки ВАХ (E_{k+1}, j_{k+1}) вокруг нового начала координат проведём окружность малого радиуса ρ_k и через точку пересечения этой окружности с осью $\varphi = \varphi_k$ (где φ_k – угол наклона касательной к ВАХ в точке (E_k, j_k) или близкий к нему) провести линию нагрузки. Линия нагрузки может быть произвольной функцией, например, прямой перпендикулярной оси $\varphi = \varphi_k$. Удобнее, чтобы она была близка к проведенной окружности, но пересекала ВАХ только в одной точке. В предлагаемом алгоритме выбрана Верзьера Аньези (красная линия на рис. 3.1б):

$$(E - E_k) \cos \varphi_k + (j - j_k) \sin \varphi_k = \rho_k \frac{4\rho_k^2 - [(E - E_k) \sin \varphi_k - (j - j_k) \cos \varphi_k]^2}{4\rho_k^2 + [(E - E_k) \sin \varphi_k - (j - j_k) \cos \varphi_k]^2}. \quad (35)$$

При достаточно малом радиусе ρ_k кривая (35) пересекает ВАХ только в одной точке вблизи проведенной окружности. Уравнения (33)-(35) замыкают исходную задачу так, что ее решение и новая точка ВАХ (E_{k+1}, j_{k+1}) находятся единственным образом. Применяя этот подход, можно рассчитать ВАХ любой сложности.

Другой подход, который также использовался в диссертации, основан на выделении «нижней» и «верхней» устойчивых ветвей решения. В рамках этого подхода ставится задача минимизации (максимизации) функционала тока (33). Решение задачи минимизации производится одним из известных методов.

Результаты главы 1 опубликованы в работах [1-3,6,7,9,12,14,20,21,30,33,34].

Во второй главе предложены параллельные алгоритмы и технологии программирования для реализации численных методов, разработанных в гл. 1 и используемых при решении выбранных прикладных задач.

В п. 2.1 рассмотрены параллельные алгоритмы на основе преобразования Фурье. Алгоритмы на базе преобразования Фурье (ПФ) используются при решении многих задач и имеют арифметическую сложность $O(N^2)$, быстрое преобразование Фурье на операциях умножения имеет арифметическую сложность $O(N \log_2 N)$ (здесь N – размерность задачи). Параллельное ПФ реализуется достаточно эффективно, однако реализации БПФ эффективны лишь для малого числа процессоров ($p = 2^m$, $m=1, 2, 3$). В диссертации предложен оптимизированный алгоритм ПФ (ОПФ) на основе синусов и/или косинусов, возникающий при решении одномерных и многомерных краевых задач для эллиптических и параболических уравнений. Он использует ту же идею, что и БПФ, но за счёт отказа от сортировки значений коэффициентов разложения и использования дополнительных массивов

памяти легко распараллеливается. Асимптотика ОПФ на комплексных операциях также имеет порядок $O(N \log_2 N)$. В реальных задачах ОПФ медленнее, чем БПФ, но существенно быстрее, чем ПФ в исходном варианте. Условие применимости ОПФ имеет вид $\log_2 p \ll C \log_2 N$, где C – константа, характеризующая скорость сети относительно скорости расчёта последовательного БПФ на единицу размерности.

В п. 2.2 рассмотрены параллельные алгоритмы на основе метода прогонки. Они применяются для решения линейных и нелинейных краевых задач для одномерных уравнений 2-го порядка, а также для решения уравнений Пуассона (либо в комбинации с ОПФ, либо в рамках итерационного метода переменных направлений) и многомерных параболических уравнений (при применении локально одномерных схем расщепления). Параллельные алгоритмы для краевых задач 1-го, 2-го и 3-го рода, а также для периодических граничных условий тривиальны и были известны ещё с работ Н.Н. Яненко [73,74] и А.Н. Коновалова [75]. В диссертации они были распространены на случай немонотонных операторов (параллельная немонотонная прогонка) и нелокальных граничных условий (параллельная интегральная прогонка) [30,31] и использованы для реализации экспоненциальных схем на ортогональных сетках [3,5,27,29,32].

В п. 2.3 рассмотрены параллельные итерационные методы решения уравнения Пуассона и стационарных экспоненциальных схем. В основном это стандартные методы на базе схемы сопряженных градиентов с предобуславливанием в виде неполного разложения Холецкого в комбинации с техникой разделения областей по процессорам [76]. В диссертации предложены и реализованы специальные методы разбиения нерегулярных сеток (треугольных и тетраэдральных) на компактные связные множества (домены), которые затем распределяются по процессорам. Особенность методики состоит в том, что каждое из решаемых уравнений может быть задано не на всей сетке, а лишь на её подмножестве. Это обстоятельство следует учитывать при построении статических и динамических разбиений сетки по процессорам.

В п. 2.4 рассмотрена параллельная реализация нестационарных схем экспоненциальной подгонки и общий подход к решению задачи, включающей уравнения различных типов. Отдельно рассмотрен случай ортогональных сеток и технология решения больших задач на нерегулярных треугольных и тетраэдральных сетках.

В п. 2.5 рассмотрен метод распараллеливания по неоднородным группам и алгоритм динамической балансировки загрузки. Здесь речь идёт о том, что в задачах типа нелинейного туннельного транспорта с непрерывным спектром можно применять метод продолжения по параметру (в данном случае по энергии). Он состоит в том, что задача решается по полному алгоритму лишь для некоторого небольшого числа значений параметра, составляющих крупную реперную сетку. А в остальных узлах параметрической сетки используется методика продолжения. При этом может оказаться, что алгоритм продолжения для каждого конкретного

значения параметра использует различное число членов в разложении решения в ряд Тейлора, и, следовательно, имеет свою отличную от других арифметическую сложность. В результате, использование метода продолжения по параметру существенно сокращает время решения задачи, однако при распараллеливании приводит к необходимости балансировки загрузки вычислителей. Нелинейность задачи не позволяет использовать статическую балансировку загрузки. Поэтому выбор был сделан в пользу динамического алгоритма. Предложенная методика [9] может использоваться также при решении задач радиационной газовой динамики.

В п. 2.6 рассмотрена гибридная технология параллельного програм-мирования, сочетающая параллельные вычисления на общей и распределённой памяти. В диссертации для её реализации на языке ANSI C были использованы интерфейс MPI и библиотека Pthreads. Для программ на языке Fortran использовался интерфейс MPI и стандарт OpenMP.

Результаты главы 2 опубликованы в работах [3,5,9,13,27,29,30-32].

В третьей главе приводятся результаты теоретического исследования низкотемпературного примесного пробоя в полупроводниках. Использованная математическая модель базировалась на нелокально-нелинейном уравнении Фоккера-Планка (12) и учитывала перезарядку возбуждённого состояния примесей и процессы рассеяния электронов, влияющие на темп ударной ионизации. В рассмотрение включались процессы ударной ионизации основного и возбужденного состояний примесей, ударное возбуждение нейтральных примесей, межэлектронные столкновения и рассеяние электронов на фонах. Численные расчёты проведены применительно к *n*-GaAs на основе разработанных в гл. 1. численных методик. В них показано, что имеются три механизма, приводящие к отрицательному дифференциальному сопротивлению, которые в реальных условиях могут образовывать общий S-образный участок вольт-амперной характеристики. Первый обусловлен уменьшением коэффициента захвата электронов на мелкие примеси с ростом частоты межэлектронных столкновений, когда они начинают контролировать функцию распределения вблизи уровня протекания. Этот механизм инициирует неустойчивость при малых токах. Второй механизм обусловлен уменьшением энергетических потерь электронов с ростом тока вследствие ослабления неупругого рассеяния на примесях при их ионизации. Третий механизм представляет собой известную перегревную неустойчивость. В качестве иллюстрации на рис. 4 приведены ВАХ в зависимости от учёта механизмов рассеяния. Результаты гл. 3 опубликованы в работе [1].

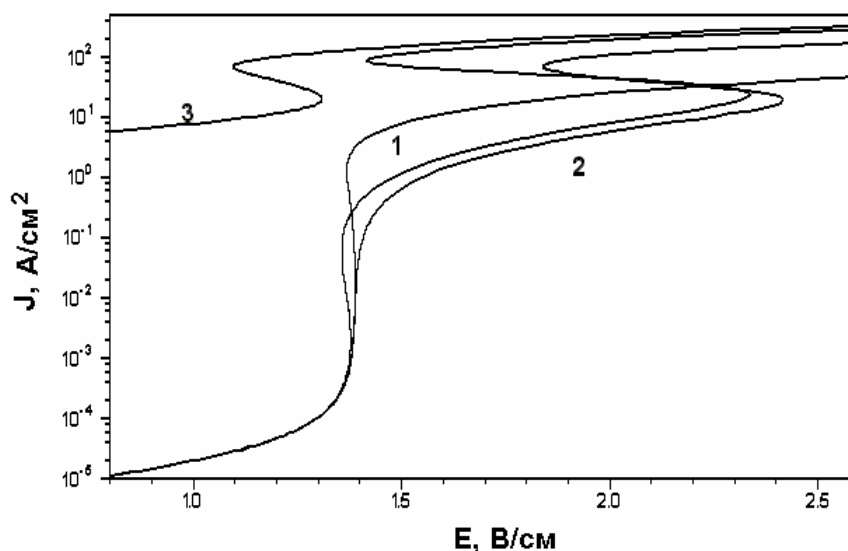


Рисунок 4. ВАХ для разных комбинаций механизмов рассеяния: жирная линия – включены все механизмы рассеяния, 1 – отсутствуют межэлектронные столкновения и неупругое примесное рассеяние, 2 – отсутствуют межэлектронные столкновения, 3 – ситуация полностью ионизованных примесей.

В четвертой главе рассматривается задача моделирования динамики фотоиндуцированных носителей заряда в слое двумерного электронного газа наноструктуры на основе AlGaAs. Данная прикладная задача возникла в связи с необходимостью создания методов оптической диагностики наноструктур с двумерным электронным газом (рис. 5). Для целей моделирования была выбрана диффузионно-дрейфовая модель, разработаны численные методы ее анализа в одномерном и двумерном случаях на базе экспоненциальных схем на регулярных декартовых сетках, созданы параллельные программные реализации. С помощью разработанных программ проведено моделирование процессов фотовозбуждения в одномерном (рис. 6) и двумерном (рис. 7) случаях. В результате проведенных исследований показано, что неравновесные носители заряда, возникающие при локальном оптическом воздействии на гетероструктуру с двумерным электронным газом, переносятся в плоскости структуры на чрезвычайно большое расстояние от места возбуждения, которое значительно превосходит длину диффузии в объеме. Эффект обусловлен тем, что генерированные светом электроны и дырки разделяются встроенным электрическим полем гетероперехода к противоположным краям буферного слоя, где они переносятся по параллельным плоскостям. Расстояние, на которое распространяется неравновесная концентрация носителей, достигает больших значений благодаря (1) высокой проводимости 2D электронов, (2) барьеру для рекомбинации электронов и дырок и (3) дрейфу дырок в электрическом поле, создаваемом зарядом неравновесных носителей в плоскости структуры. Результаты теоретических исследований и численного моделирования согласуются с известными

экспериментальными данными. Парактическое применение эффекта латерального переноса – бесконтактная диагностика гетероструктур на этапе роста.

Результаты гл. 4 опубликованы в работах [2,3,22,23].

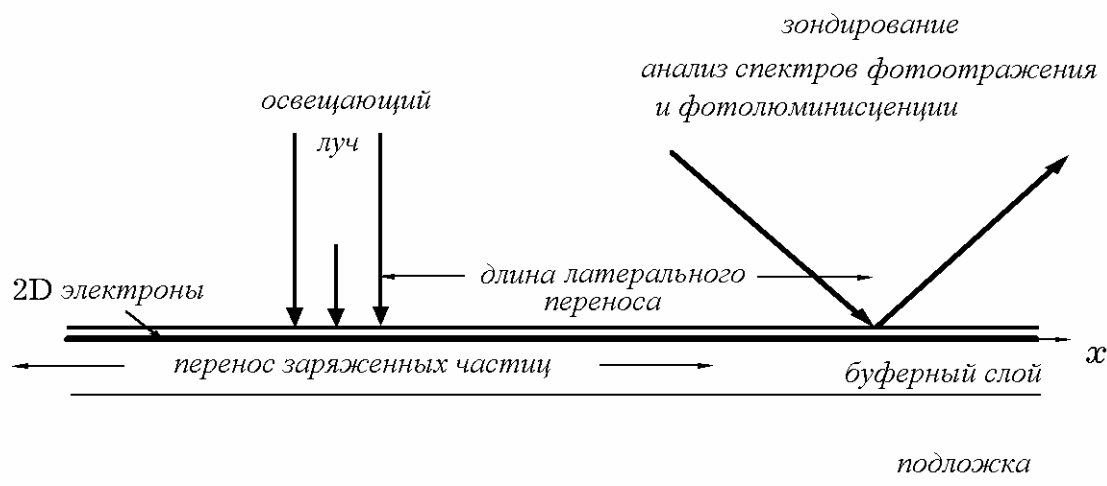


Рисунок 5. Схема эксперимента.

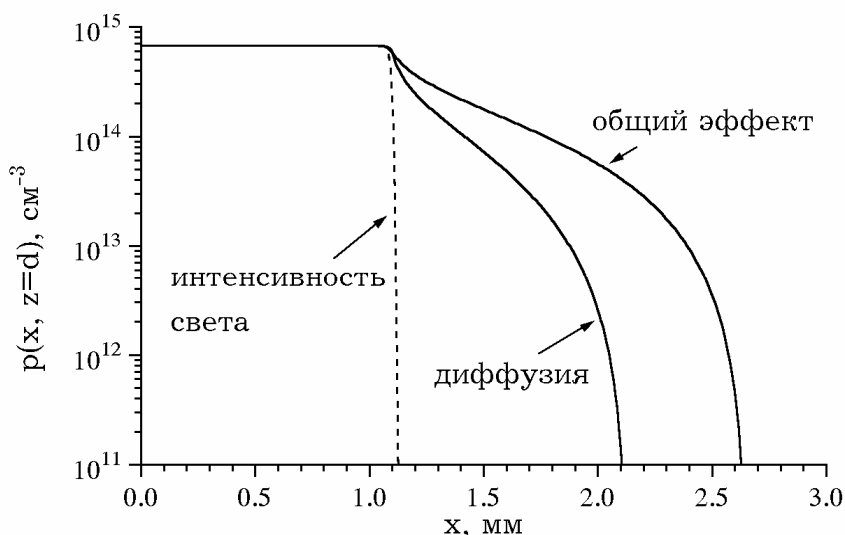


Рисунок 6. Распределение концентрации неравновесных носителей в плоскости гетероструктуры. Пунктир – распределение интенсивности света.

В пятой главе рассматриваются проблемы моделирования нелинейного электронного транспорта в квантовых каналах наноструктур на основе AlGaAs. Размеры рассматриваемых структур лежат в субмикронной и нанометровой области. Такие структуры принято называть мезоскопическими. Математические модели электронных процессов в мезоскопических структурах формулируются обычно на основе комбинации классического и квантового описаний. Причиной тому служит существенное влияние квантовых эффектов на характеристики электронного транспорта, а также существенные трудности в реализации полного квантово-механического подхода.

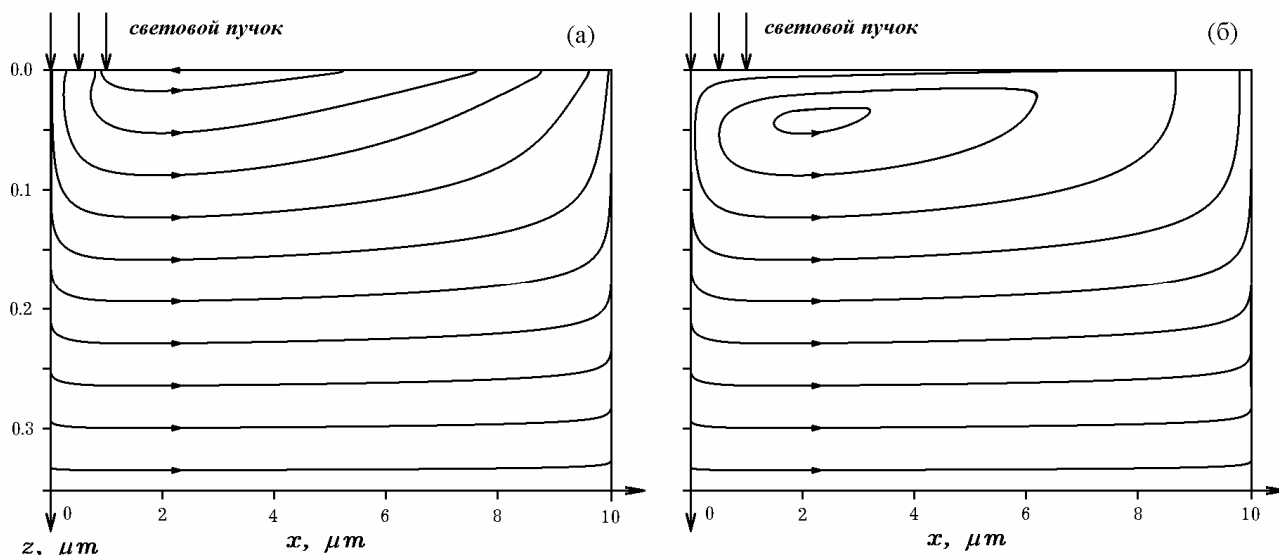


Рисунок 7. Линии фотоиндуцированного тока для двух значений концентрации двумерных состояний в квантовой яме: $n_s = 9 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ (а) и $n_s = 5 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ (б).

В диссертации развита и исследована новая математическая модель квазистационарного одномерного электронного транспорта в квантовом канале гетероструктуры AlGaAs/GaAs, образованном в слое двумерного электронного газа. Предполагается, что канал имеет цилиндрически симметричную форму (то есть является квантовой проволокой) с радиусом порядка 5 нм и длиной от 5 до 250 нм. Математическое описание электронного транспорта формулируется для одночастичных волновых функций электронов в канале. Состояния электронов в канале описываются плоскими волнами, распространяющимися вдоль канала в прямом и обратном направлениях. Спин электронов также учитывается. Физическая задача имеет непрерывный спектр и рассматривается в рамках статистики Ферми для вырожденного электронного газа. В этих предположениях применяется квазистационарная квантовая модель самосогласованного поля в приближении Хартри-Фока (18), которая характеризуется существенной нелокальной нелинейностью.

Для выбранной математической модели разработаны параллельные численные алгоритмы, имеющие базой методы и подходы, описанные в гл. 1 и 2, и параллельная программа **NANO_2D**. С ее помощью проведено детальное численное моделирование процессов электронного транспорта. В результате численного моделирования исследовано влияние приложенного к каналу напряжения на электронную проводимость, рассчитаны вольт-амперные характеристики. Обнаружено, что в некоторых ситуациях реализуется неустойчивость квазистационарных состояний канала, а именно, би- или мультистабильность (рис. 8-10). Она вызвана перераспределением эффективного потенциального барьера канала и образованием локализованных состояний ниже дна зоны проводимости. Наличие дополнительных

локализованных состояний зависит от величины приложенного напряжения, длины канала, величины энергетической щели, фактора спонтанной спиновой поляризации. На основе полученных расчетных данных можно предложить несколько способов реализации электронных приборов, основанных на квантовых эффектах.

Результаты главы 5 опубликованы в работах [8-10,15-19,26].

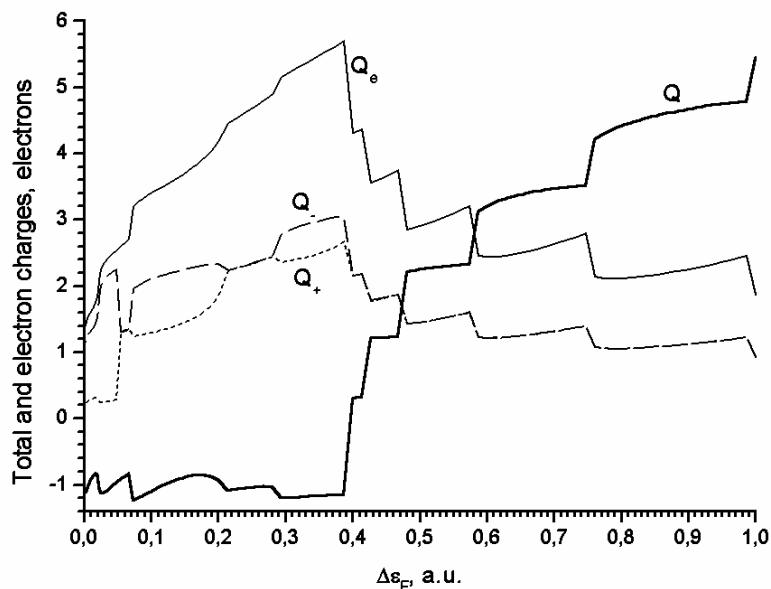


Рисунок 8. Зависимость суммарного заряда канала от величины энергетической щели $\Delta\bar{\epsilon}_F$.

В шестой главе рассматривается проблема решения задач электродинамики в современных вакуумных полупроводниковых приборах со сложной субмикронной и нанометровой геометрией. В качестве приложения выбрана задача полевой эмиссии из кремниевого микроатома в вакуум. Для описания процессов в полупроводнике используется квазигидродинамическая модель вида (1)-(9), (10), (11). На эмитирующей поверхности полупроводника используется линейная модель туннельного транспорта (14)-(16). Для анализа модели предложены численные методы на ортогональных и нерегулярных треугольных и тетраэдральных сетках, развитые в гл. 1. Для реализации методов предложены параллельные алгоритмы и разработан комплекс параллельных программ **MICRO 2D/3D** для многопроцессорных вычислительных систем гибридной архитектуры. С помощью разработанного комплекса можно рассчитать распределения электрического поля, плотности зарядов и тепла в различных частях прибора и оценить их влияние на его рабочие характеристики.

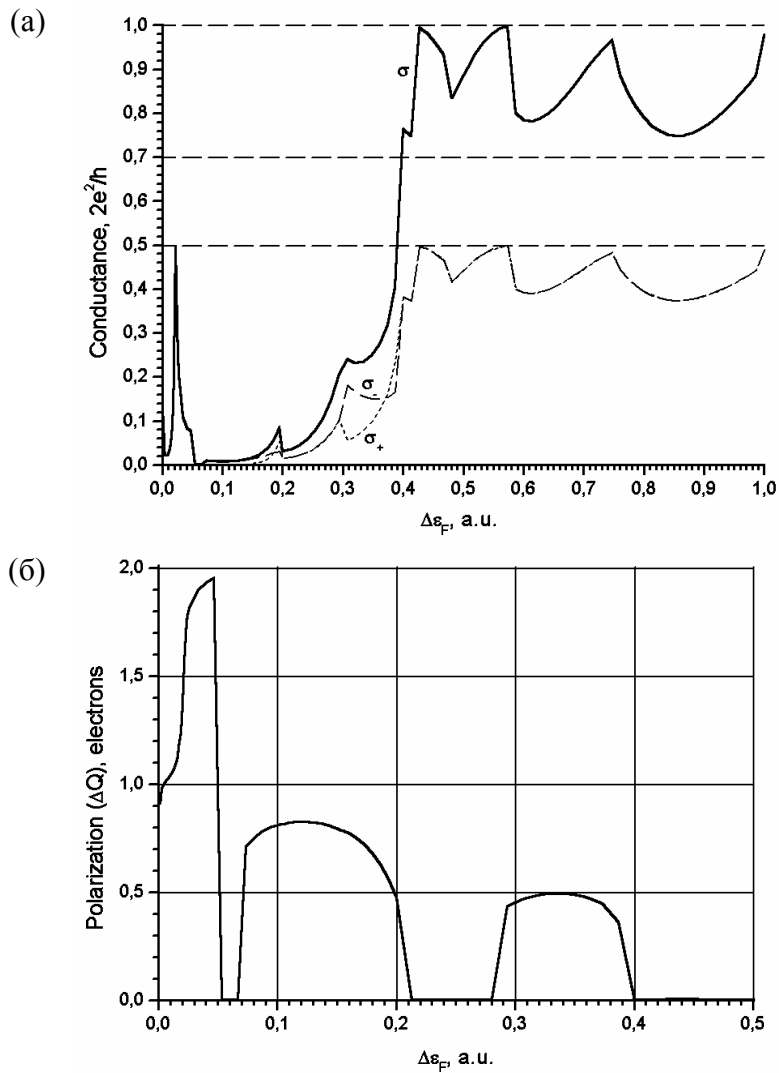


Рисунок 9. Проводимость (а) и поляризация (б) канала как функции энергетической щели $\Delta\bar{\epsilon}_F$.

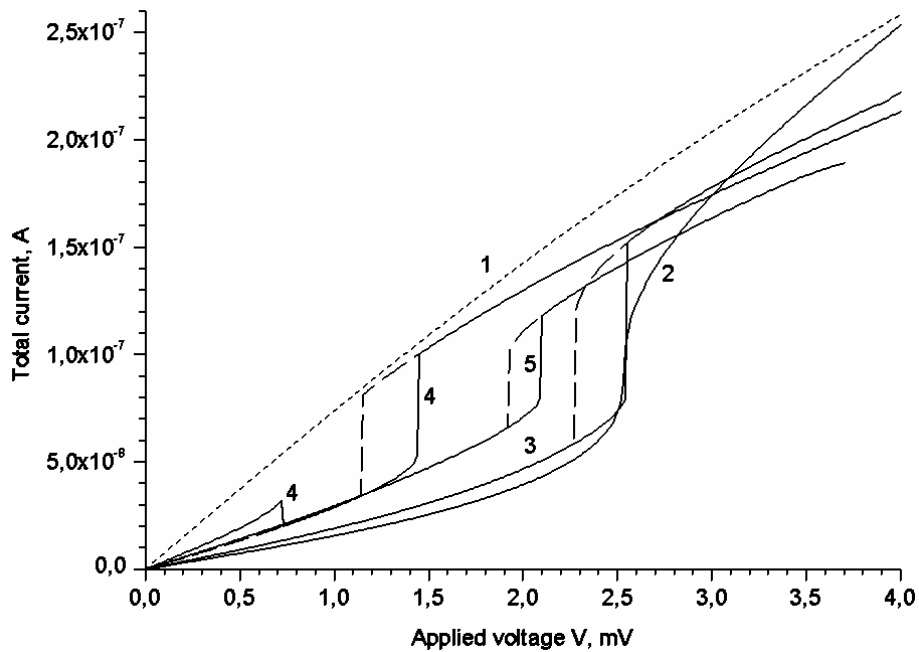


Рисунок 10. ВАХ для $\beta = 0, 0.066, 0.099, 0.132, 0.165$ (кривые 1-5).
Сплошной линией обозначены нижние ветви ВАХ, пунктирной – верхние.

В проведённых численных экспериментах в рамках двухтемпературной модели сначала исследовалась модельная кремниевая ячейка прямоугольной формы с заданным профилем модуля электрического поля на эмиттирующей поверхности E_s (рис. 11а) и зависимостью коэффициента туннелирования в виде формулы Фаулера-Нордгейма. Были рассчитаны двумерные распределения электрического потенциала φ , электронной температуры T и концентрации электронов n в структуре, получены распределения электрического поля и нормальной компоненты плотности тока на лицевой и тыловой поверхностях ячейки (рис. 11б), полевые зависимости тока эмиссии (рис. 12).

Затем были проведены расчёты в рамках трёхтемпературной модели с учётом процессов ударной ионизации. Распределения основных характеристик показаны на рис. 13. Анализ расчётов показал, что ударная ионизация существенным образом меняет процесс переноса в автокатоде при актуальных значениях тянущего поля. Концентрация дырок внутри катода достигает заметной величины, так что токоперенос внутри полупроводникового полевого эмиттера носит скорее биполярный, чем униполярный характер. Концентрация электронов вблизи эмиттирующей поверхности вследствие ударной ионизации еще более возрастает. С другой стороны, ударная ионизация приводит к некоторому охлаждению электронного газа и служит механизмом, ограничивающим беспредельный разогрев электронов проводимости. Электронная температура при учете ударной ионизации оказывается существенно ближе к экспериментальным данным.

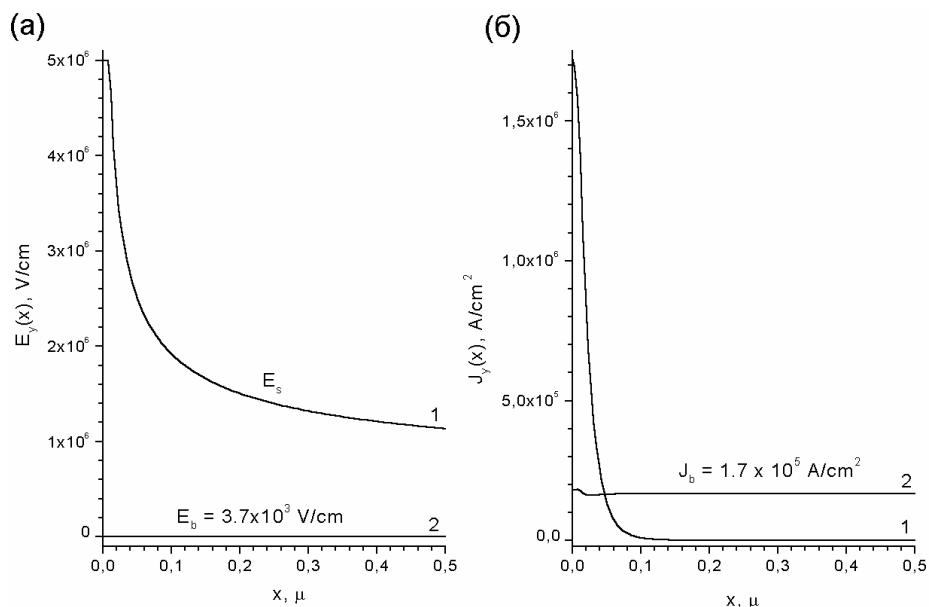


Рисунок 11. Распределения электрического поля (а) и нормальной компоненты плотности тока (б) на лицевой (кривые 1) и тыльной (кривые 2) поверхностях.

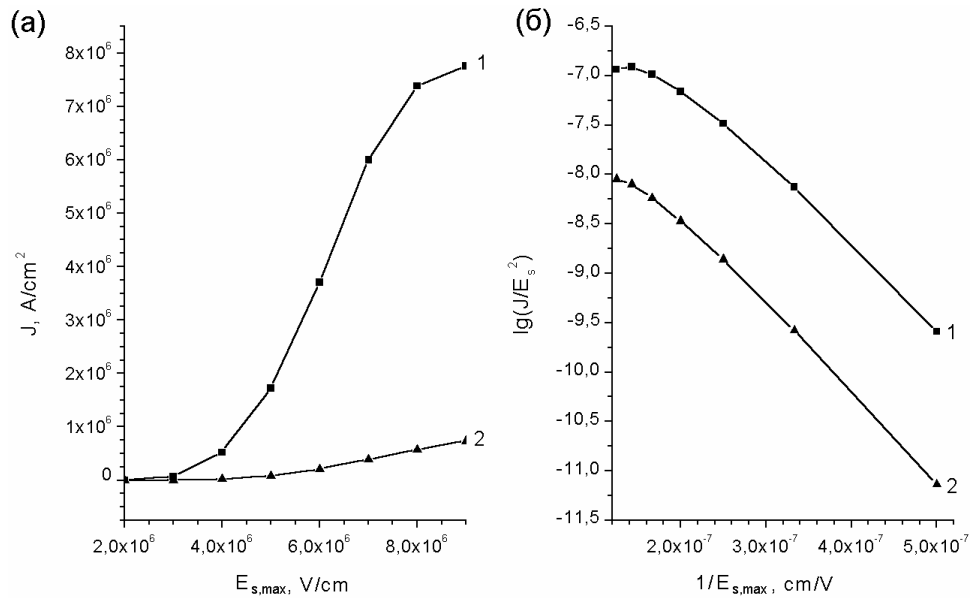


Рисунок 12. Полевые зависимости плотности тока эмиссии: максимальной - (1) и средней по эмитирующей поверхности ячейки - (2).

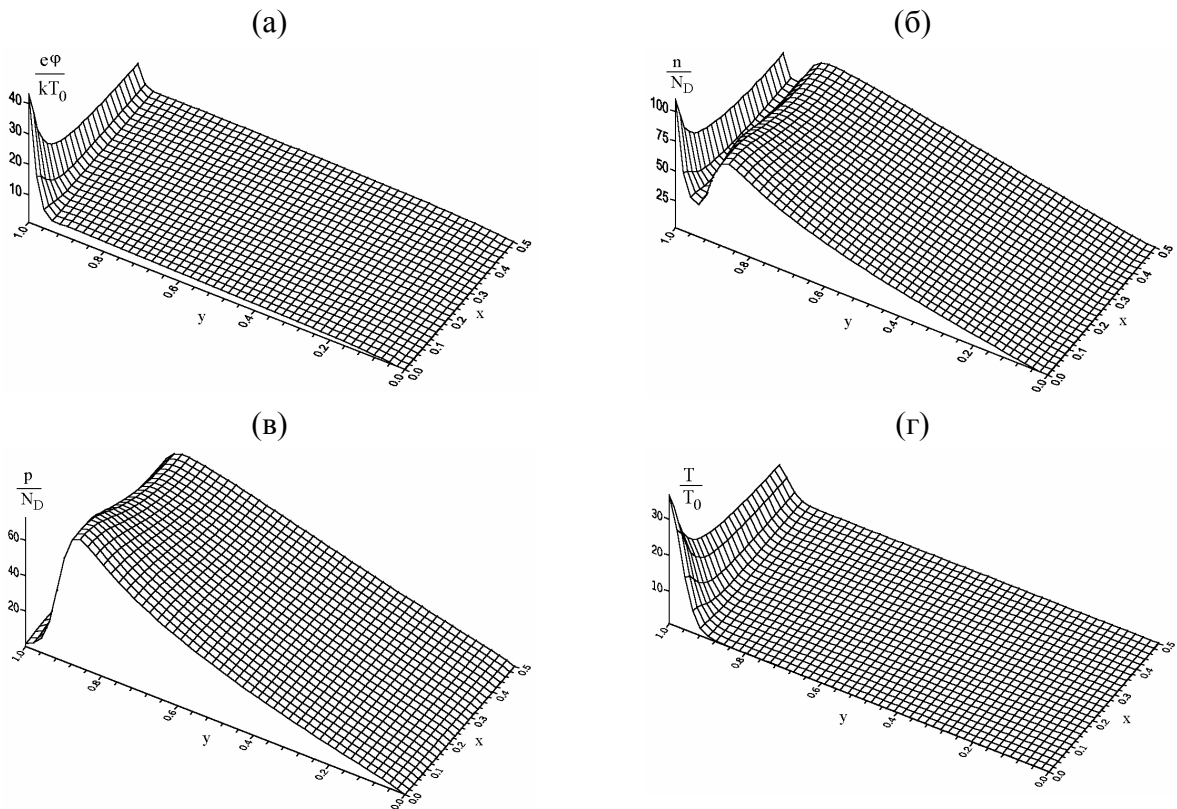


Рисунок 13. Установившиеся двумерные распределения электрического потенциала (а), концентраций электронов (б) и дырок (в) и электронной температуры (г).

Далее были проведены расчёты эмиссионных процессов в двумерной ячейке с острым катодом реальной геометрии. Расчёты проводились на треугольной сетке. Для иллюстрации приведем данные для области с размерами 1.5×3 мкм. Полуширина анода была равна 1.5 мкм, высота катода – 1.5 мкм, высота острия – 0.3 мкм, радиус скругления острия – 20 нм, полуширина основания острия – 60 нм. Потенциал на

аноде был равен 1000 В. Расчет проводился на последовательности сеток. Стартовая треугольная сетка имела параметры: число узлов сетки во всей области составляло 35480, в области катода – 17660; число треугольников во всей области – 70049, в области катода – 34666. Далее стартовая сетка измельчалась в до 16 раз.

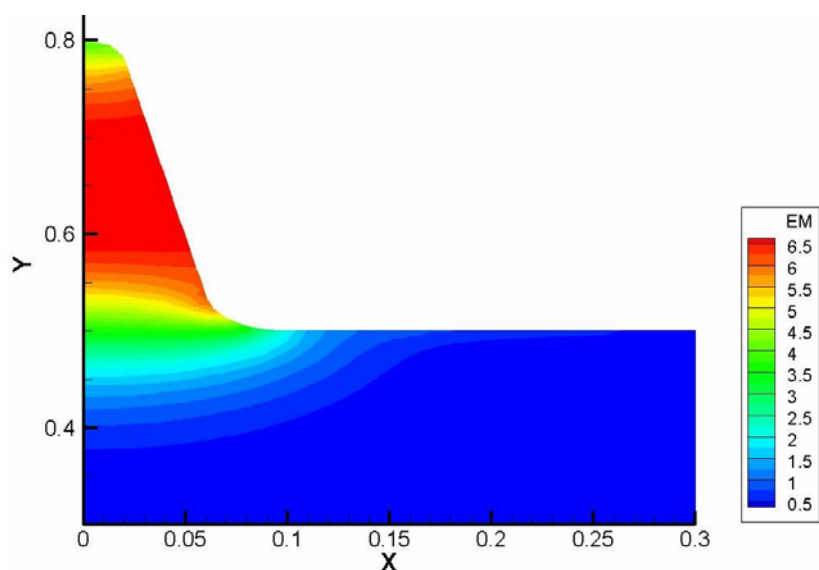


Рисунок 14. Распределение модуля электрического поля в области острия катода.

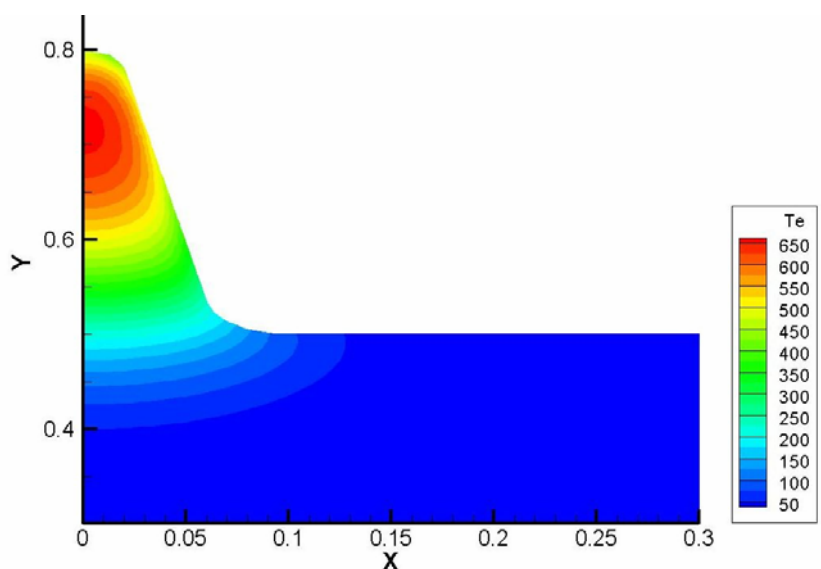


Рисунок 15. Распределение электронной температуры в области острия катода.

На рис. 14-16 показаны распределения модуля электрического поля, температуры и энергии электронов в области острия во время переходного процесса. Из рис. 14 видно, что максимум поля достигается в средней части острия и глубоко проникает в его объем. Разогрев электронов максимален в верхней части острия (рис. 15). Таким образом, верхняя и средняя подобласти острия подвержены максимальному воздействию электрического поля и тепла. Как показывают натурные эксперименты, именно эти подобласти разрушаются в первую очередь в процессе эксплуатации катодов.

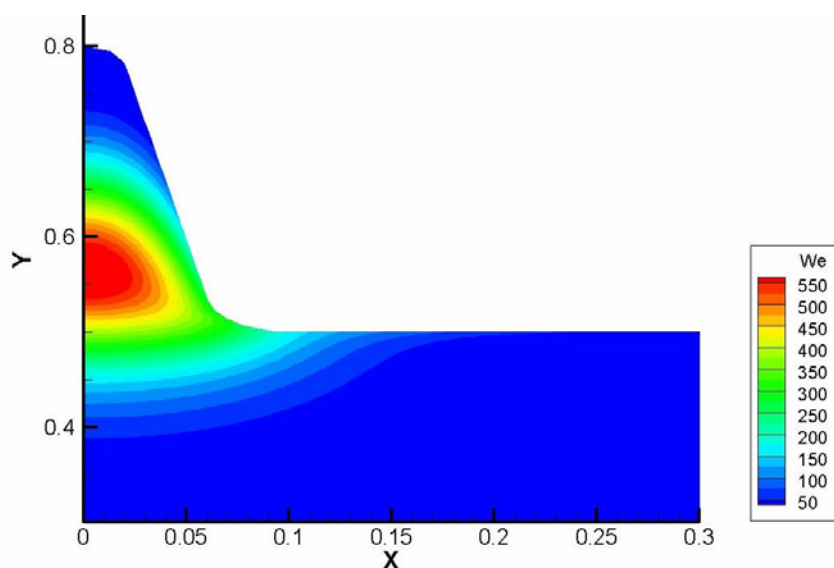


Рисунок 16. Распределение энергии электронов в области острия катода.

В результате численных исследований данной прикладной задачи показано, что учёт разогрева неравновесных электронов, а также процессов ударной ионизации и реальной геометрии микро- или наноструктуры являются необходимыми условиями для адекватного численного анализа конкретных конфигураций ячеек автокатодов, а также их матриц. Созданный в рамках данной тематики программный комплекс **MICRO_2D/3D** позволяет рассчитывать с помощью МВС эмиссионные приборы на основе кремния любой реальной конфигурации и может быть включен в цикл промышленной разработки подобных устройств.

Результаты гл. 6 опубликованы в работах [4,5,13,24,25,27-29,32].

В седьмой главе рассмотрены проблемы моделирования образования и миграции пор в межсоединениях электрических схем. Предложена математическая модель процессов, основанная на дрейфо-диффузионном приближении и учитывающая процессы диффузии, теплопроводности, электропроводности и термомеханической деформации многослойной структуры, содержащей медные электрические линии и их соединения. Для анализа модели в случае плоской прямоугольной геометрии межсоединения построены монотонные консервативные конечно-разностные схемы (подобные разработанным в гл. 1), разработаны алгоритмы их численной реализации для персонального компьютера и многопроцессорных вычислительных систем (см. гл. 2). На основе этих разработок по заказу компании LSI Logic Incorporation (США) создан комплекс параллельных программ **VOID_2D/3D**. Тестирование разработанного подхода и комплекса программ проведена на модельной задаче. В численных экспериментах показано, что модель качественно и количественно описывает основные физические процессы и может быть использована на этапе разработки новых микросхем.

Для иллюстрации приведем пример расчёта процессов порообразования и миграции в силовом элементе многослойной структуры чипа, содержащей

межсоединение (рис. 17). В реальной ситуации наиболее уязвимым местом является как раз межсоединение двух линий (на рис. 17 оно в центре). Межсоединение имеет малую толщину и по нему течет максимальный ток. Причиной порообразования является так называемый электронный ветер, возникающий при прохождении тока через проводник. Неравновесные электроны увлекают за собой атомы металлической решётки, и тем интенсивнее, чем больше дефектов и крупнее зерновая структура проводника. Другими причинами являются спонтанный термоток или ток, вызванный термомеханическими напряжениями.

На рис. 18-19 показаны распределения массовой доли меди и модуля электрического тока до образования поры и после завершения ее эволюции. Как видно из рисунков пора перекрывает основной канал прохождения тока (рис. 18б). При этом слева и справа от межсоединения в тантале образовались два шнура тока, которые потенциально могут нарушить правильный цикл работы чипа (т.к. сопротивление тантала в более чем 100 раз выше, чем у меди), а также привести к перегреву и прямому разрушению структуры вблизи межсоединения. Именно это и наблюдается в натуральных экспериментах.

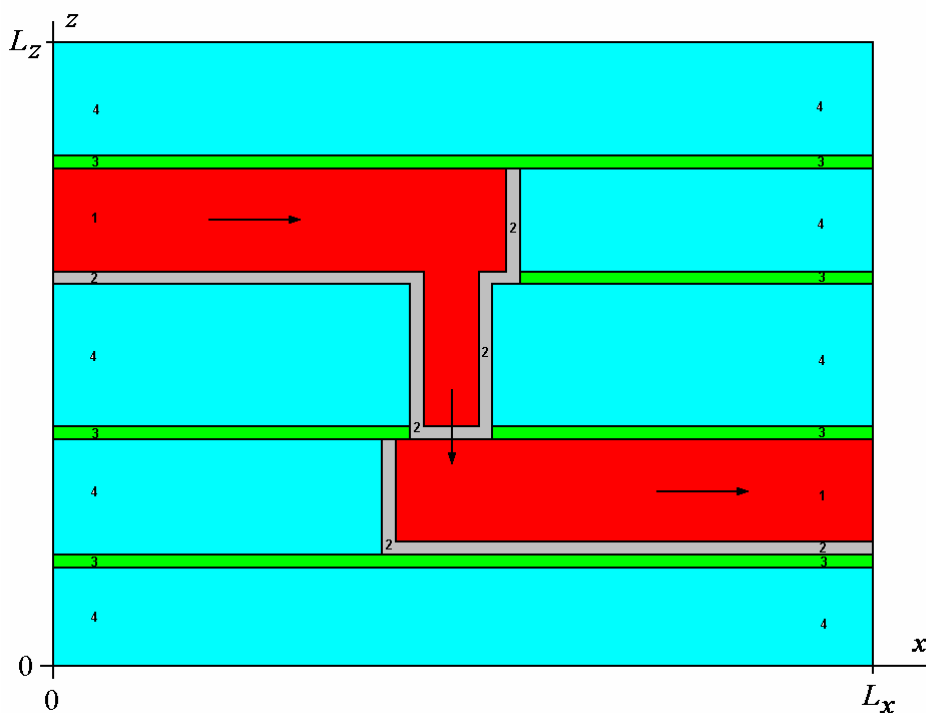


Рисунок 17. Пример геометрии задачи. Цифрами 1, 2, 3, 4 и цветом обозначены включения меди, тантала, карбида кремния и композитного теплоизолятора. Стрелками обозначено направление протекания электрического тока.

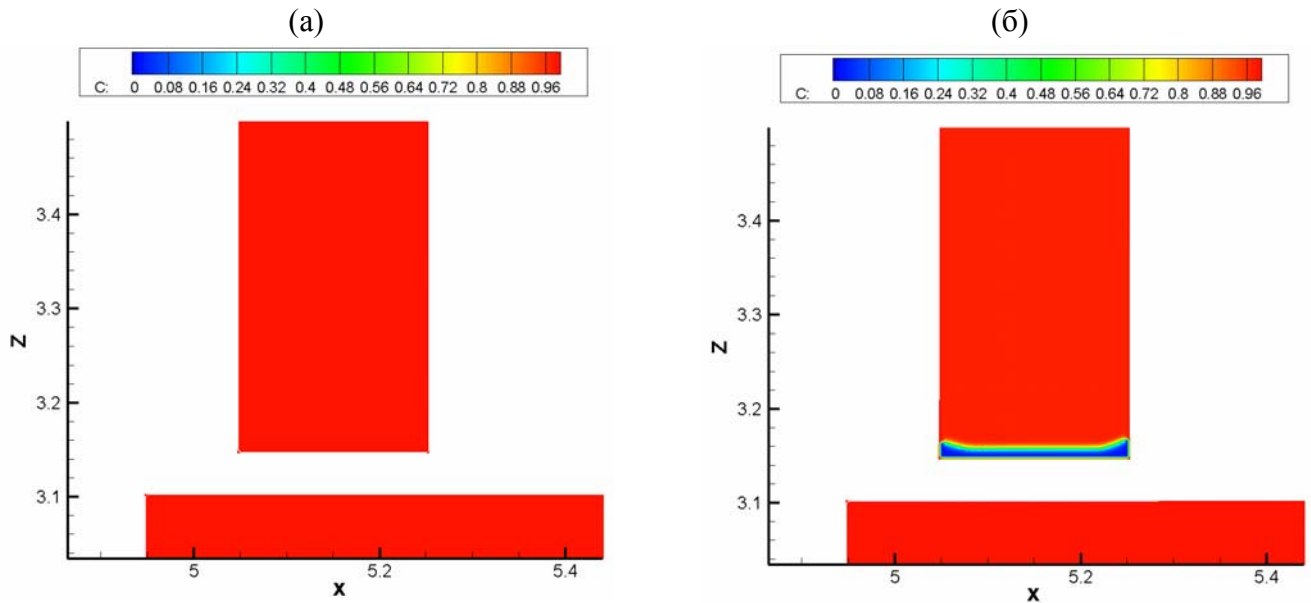


Рисунок 18. Распределение массовой доли меди в межсоединении до рождения поры (а) и в финале ее эволюции (б).

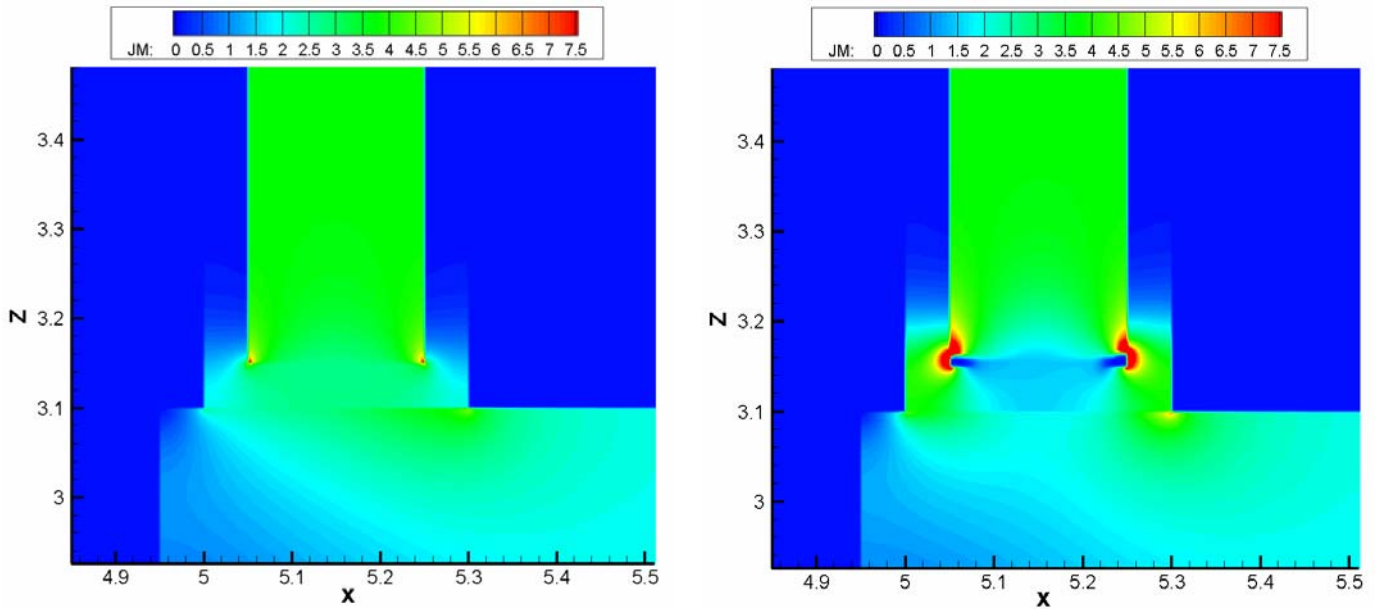


Рисунок 19. Распределение модуля тока в межсоединении до рождения поры (а) и в финале ее эволюции (б).

Результаты гл. 7 опубликованы в работе [11] и отчётах LSI Logic Incorporation.

В заключении сформулированы основные выводы и приведены выносимые на защиту результаты.

ОСНОВНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ, ВЫНОСИМЫЕ НА ЗАЩИТУ

На защиту выносятся следующие положения диссертации:

1. На основе анализа состояния научных исследований в области твердотельной и вакуумной микро- и нанoeлектроники разработаны вычислительные основы математического моделирования с помощью многопроцессорных вычислительных систем нескольких актуальных для приложений классов задач.
2. Развита математические модели электронной эмиссии с поверхности кремниевых микро- и наноструктур и электро-, термо- и стресс- миграции пор в медных межсоединениях электронных схем.
3. Разработаны конечно-объемные схемы экспоненциальной подгонки для решения начально-краевых задач для эволюционных уравнений на ортогональных и нерегулярных треугольных и тетраэдральных сетках.
4. Предложены методика регуляризации и численные алгоритмы решения пространственно нуль-мерных и одномерных нелокально нелинейных некорректных математических задач, моделирующих электронные процессы в наноструктурах.
5. Разработаны параллельные алгоритмы решения задач электронного транспорта в полупроводниковых твердотельных и вакуумных микро- и наноструктурах, в том числе, алгоритмы распараллеливания явных и неявных конечно-объемных схем на нерегулярных сетках для решения системы квазигидродинамических уравнений, описывающих динамику электронно-дырочной плазмы, а также алгоритм решения, включающий динамическую балансировку загрузки вычислителей, нелокально нелинейной задачи одномерного электронного транспорта в канале наноструктуры.
6. Созданы комплексы параллельных программ MICRO_2D/3D и VOID_2D/3D для моделирования процессов электронной эмиссии с поверхности кремниевых автокатодов и электро-, термо- и стресс- миграции пор в медных межсоединениях электронных схем.
7. С помощью разработанных вычислительных методик и комплексов программ методами математического моделирования и вычислительного эксперимента получены новые результаты в исследовании процессов низкотемпературного примесного пробоя в полупроводниках типа GaAs, одномерного электронного транспорта в наноструктурах на основе AlGaAs, автоэлектронной эмиссии из кремниевого микрокатода с учетом реальной геометрии структуры.

ОСНОВНЫЕ ПУБЛИКАЦИИ И СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. В.А. Сабликов, С.В. Поляков, О.А. Рябушкин. О механизме низкотемпературного примесного пробоя // ФТП, 1996, Т. 30, вып. 7. С. 1251-1264.
2. В.А. Сабликов, С.В. Поляков, О.А. Рябушкин. Эффект латерального переноса фотоиндуцированных носителей заряда в гетероструктуре с двумерным электронным газом // ФТП. 1997. Т. 31, вып. 4. С. 393-399.
3. С.В. Поляков, В.А. Сабликов. Латеральный перенос фотоиндуцированных носителей заряда в гетероструктурах с двумерным электронным газом // Математическое моделирование. 1997. Т. 9, N 12. С. 76-86.
4. В.А. Федирко, С.В. Поляков, Ю.Н. Карамзин, И.Г. Захарова. Моделирование полевой эмиссии горячих электронов из кремниевого микрокатода. // Прикладная физика. 1999. Вып. 1. С. 102-111.
5. В.А. Федирко, С.В. Поляков. Численное моделирование электронного переноса в полупроводниковом автоэммитере. // Прикладная физика. 2000. Вып. 3. С. 7-13.
6. Ю.Н. Карамзин, С.В. Поляков, И.В. Попов. Разностные схемы для параболических уравнений на треугольных сетках. // Известия высших учебных заведений. Серия Математика. 2003. 1(488), с. 53-59.
7. Ю.Н. Карамзин, И.В. Попов, С.В. Поляков. Разностные методы решения задач механики сплошной среды на неструктурированных треугольных и тетраэдральных сетках. // Математическое моделирование. 2003, 15(11), с. 3-12.
8. В.А. Сабликов, С.В. Поляков. Спонтанная спиновая поляризация и электронные корреляции в мезоскопических квантовых проводках. // Известия академии наук. Серия физическая. 2004, 68(1), с. 39-41.
9. Поляков С.В. Численные методы для моделирования электронных процессов в квантовых структурах. Вестник ННГУ. Серия "Математическое моделирование и оптимальное управление". 2005, вып. 1(28), с. 200-207.
10. Поляков С.В. Моделирование электронного транспорта в условиях спонтанной спиновой поляризации. Вестник ННГУ. Серия "Математическое моделирование и оптимальное управление". 2005, вып. 2(29), с. 192-200.
11. Ю.Н. Карамзин, С.В. Поляков, И.В. Попов, Г.М. Кобельков, С.Г. Кобельков, Лип Но Шоу. Моделирование процессов образования и миграции пор в межсоединениях электрических схем. // Математическое моделирование, 2007, 19(10), с. 29-43.
12. С.В. Поляков. Экспоненциальные схемы для решения эволюционных уравнений на нерегулярных сетках. // Ученые записки казанского государственного

- университета. Серия "Физико-математические науки", 2007, т. 149, кн. 4, с. 121-131.
13. С.В. Поляков, В.А. Федирко. Программный комплекс для моделирования катодного микроузла с полупроводниковым автоэммиттером. // Прикладная физика, 2008, вып. 2, с. 48-55.
 14. Федирко В.А., Поляков С.В., Зенюк Д.А. Матричный метод для моделирования туннельного переноса. // Математическое моделирование, 2010, 22(5), с. 3-14.
 15. V.A. Sablikov and S.V. Polyakov. Dynamic Conductance of Interacting Electrons in a Mesoscopic Quantum Wire. // Phys. Low-Dim. Struct. 1998. V. 5/6. P. 101-110.
 16. V.A. Sablikov, S.V. Polyakov and M. Buttiker. Charging Effects in a Quantum Wire with Leads. // Cond. Mat., 1999, No. 9908395, 11 p.
 17. V.A. Sablikov, S.V. Polyakov, M. Buttiker. Charging effects in a quantum wire with leads. // Phys. Rev. B. 2000. V. 61, No. 20, pp. 13763-13773.
 18. S.V. Polyakov. Simulation of nonlinear electron transport in a quantum wires. // Journal of Computational Methods in Sciences and Engineering (JCMSE). 2002, 2(1s-2s), pp. 207-212.
 19. V.A. Sablikov and S.V. Polyakov. Spin-Charge Structure of Quantum Wires Coupled To Electron Reservoirs. // International Journal of Nanoscience (IJN), 2003, Vol. 2, No. 6, pp. 487-494. (World Scientific Publishing Company)
 20. S. Polyakov, M. Iakovovski. Geometrical Simulation and Vizualization in Nanoelectronics Problems. // Computer Graphics & Geometry, 2009, Spring, V. 11, N. 1, pp. 44-68. (<http://www.cgg-journal.com/2009-1/05/index.html>)
 21. С.В. Поляков, М.В. Якобовский. Геометрическое моделирование и визуализация в задачах современной электроники. // "Научная визуализация", 2009, 1(1), с. 19-65. (<http://sv-journal.com/2009-1/index.php?lang=ru>)
 22. V.A. Sablikov, O.A. Ryabushkin, S.V. Polyakov, and V.G. Mokerov. Lateral transfer of light-induced charge carriers in heterostructures with 2D electron gas. / In: "Nanostructures: Physics and Technology - 96", Int. Symposium, St.Petersburg, Russia, 1996. Abstracts of invited lectures and contributed papers, Russian Academy of Sciences, 1996, pp. 26-29.
 23. V.A. Sablikov, S.V. Polyakov. Optical-beam-induced currents in modulation doped heterostructures. / In: "Nanostructures: Physics and Technology", 5th Int. Symposium, St.Petersburg, Russia, June 23-27, 1997, proceedings (Eds. Zh. Alferov and L. Esaki), pp. 555-558. Published by Ioffe Physico-Technical Institute, St.Petersburg, 1997.
 24. В.А. Федирко, Ю.Н. Карамзин, И.Г. Захарова, С.В. Поляков. Двумерная модель полевой эмиссии электронов из кремниевого микрокатода. / В сб.

- "Фундаментальные физико-математические проблемы и моделирование технико-технологических систем"*, с. 97-105. – М., Изд-во "СТАНКИН", 1998.
25. V.A. Fedirko and S.V. Polyakov. *Modelling of 2D Electron Field Emission from Silicon Microcathode*. / In: *"Mathematical Models of Non-Linear Excitations, Transfer, Dynamics, and Control in Condensed Systems and Other Media"* (Eds. L.A. Uvarova, A.E. Arinshtein, and A.V. Latyshev), pp. 221-228, Plenum press, New York, 1999.
26. V.A. Sablikov and S.V. Polyakov. *Charging effects in a quantum wire with leads*. / In: *"Nanostructures: Physics and Technology"*, 7th Int. Symposium, St.Petersburg, Russia, June 14-18, 1999, Proceedings (Eds. Zh. Alferov and L. Esaki), pp. 463-466. Published by Ioffe Physico-Technical Institute, St.Petersburg, 1999.
27. В.А. Федирко, С.В. Поляков. Численное моделирование переноса горячих электронов в полупроводниковом автоэммиттере. / В сб. *"Фундаментальные физико-математические проблемы и моделирование технико-технологических систем"*, вып. 3, с. 117-122. М., Изд-во "СТАНКИН", 2000.
28. V.A. Fedirko and S.V. Polyakov. *Hot Electron Transport in Semiconductor Field Microemitter*. / In: *"Fourth All-Russian Seminar on Problems of Theoretical and Applied Electron Optics"*, Anatoly M. Filachev, Editor, Proceedings of SPIE, Vol. 4187 (2000), pp. 94-99.
29. В.А. Федирко, С.В. Поляков. Моделирование ударной ионизации в полупроводниковом автоэммиттере. / В сб. *"Фундаментальные физико-математические проблемы и моделирование технико-технологических систем"*, вып. 4, с. 128-135. М., Изд-во "СТАНКИН", 2001.
30. Т.А. Кудряшова, С.В. Поляков. О некоторых методах решения краевых задач на многопроцессорных вычислительных системах. Труды четвертой международной конференции по математическому моделированию, 27 июня - 1 июля 2000 г., г. Москва, том 2, с. 134-145. М., Изд-во "СТАНКИН", 2001.
31. Т.А. Кудряшова, С.В. Поляков. Параллельные алгоритмы решения многомерных краевых задач для параболических уравнений. / В сб. *"Фундаментальные физико-математические проблемы и моделирование технико-технологических систем"*, вып. 6, с. 212-226. – М., Изд-во "Janus-K", 2003.
32. В.А. Федирко, С.В. Поляков. Моделирование на МВС устройств вакуумной микроэлектроники, / В сб. *"Фундаментальные физико-математические проблемы и моделирование технико-технологических систем"*, вып. 7, с. 138-147. - М.: Янус-К, ИЦ МГТУ "Станкин", 2004.
33. В.А. Федирко, Д.А. Зенюк, С.В. Поляков. Численное моделирование стационарного туннелирования электронов через потенциальный барьер. / В сб. *"Фундаментальные физико-математические проблемы и моделирование*

- технико-технологических систем", вып. 12. Том 1, с. 170-184. - М.: "Янус-К", 2009.*
34. Ю.Н. Карамзин, С.В. Поляков. Экспоненциальные конечно-объёмные схемы для решения эллиптических и параболических уравнений общего вида на нерегулярных сетках. / В кн. "Сеточные методы для краевых задач и приложения. Материалы Восьмой Всероссийской конференции, посвященной 80-летию со дня рождения А.Д. Ляшко", с. 234-248. - Казань: Казанский университет, 2010.
35. В.Л. Бонч-Бруевич, С.Г. Калашников. Физика полупроводников. – М., Наука, 1977.
36. Ч. Киттель. Введение в физику твердого тела. – М., Высшая школа, 1978.
37. С. Зи. Физика полупроводниковых приборов. – М., Мир, 1984.
38. S. Selberherr. Analysis and simulations of semiconductor devices. – Wien-N.Y., Springer-Verlag, 1984.
39. Б.С. Польский. Численное моделирование полупроводниковых приборов. – Рига, Зинатне, 1986.
40. R. Stratton. Diffusion of hot and cold electrons in semiconductor barriers // Phys. Rev., 1962, 126(6), pp. 2002-2014.
41. R. Bosch, H.W. Thim. Computer simulation of transferred electron devices using the displaced Maxwellian approach // IEEE Trans., 1974, ED-21(1), pp. 16-25.
42. К. Зеегер. Физика полупроводников. – М., Мир, 1977.
43. К. Черчиньяни. Теория и приложения уравнения Больцмана. – М., Мир, 1978.
44. W.R. Curtice, Y.-H. Yun. A temperature model for the GaAs MESFET. // IEEE Trans., 1981, ED-28(8), pp. 954-962.
45. R.K. Mains, G.I. Haddad, P.A. Blakey. Simulation of GaAs IPATT diodes including energy and velocity transport equations // IEEE Trans., 1983, ED-30(10), pp. 1327-1338.
46. В.И. Рыжий, Н.А. Баннов, В.А. Федирко. Баллистический и квазибаллистический транспорт в полупроводниковых структурах. // ФТП, 1984, 18(5), с. 769.
47. Y.-K. Feng, A. Hintz. Simulation of submicrometer GaAs MESFET's using full hydrodynamic model // IEEE Trans., 1988, ED-35(9), pp. 1419-1431.
48. Й. Имри. Введение в мезоскопическую физику. – М., Физматлит, 2002.
49. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Статистическая физика. Ч. 1. – М., Наука, 1976.
50. Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский. Физическая кинетика. – М., Наука, 1978.
51. И.И. Ляпилин. Введение в теорию кинетических уравнений. – Екатеринбург, УГТУ-УПИ, 2004.
52. Ж.А. Биттенкорт. Основы физики плазмы. / Пер. с англ. под общ. ред. Л.М. Зеленого. – М. Физматлит, 2009.

53. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Теоретическая физика. Учебное пособие для вузов в десяти томах. Том III. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. – М., Физматлит, 2008.
54. Д. Хартри. Расчёты атомных структур. – М., ИИЛ, 1960.
55. Дж. Слэтер. Методы самосогласованного поля для молекул и твердых тел. – М., Мир, 1978.
56. В.А. Фок. Начала квантовой механики. – М., Наука, 1976.
57. В.П. Ильин. Методы конечных разностей и конечных объемов для эллиптических уравнений. – Новосибирск, Изд-во Ин-та математики СО РАН, 2000.
58. R. Eymard, T. R. Gallouet, R. Herbin. The finite volume method. / In: “Handbook of Numerical Analysis” (Editors: P.G. Ciarlet and J.L. Lions), 2000, Vol. VII, pp. 713-1020.
59. Randall J. LeVeque. Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems. – Cambridge University Press, 2002.
60. А.А. Самарский. О монотонных разностных схемах для эллиптических и параболических уравнений в случае несамосопряженного эллиптического оператора. // ЖВМиМФ, 1965, 5(3), с. 548-551.
61. Е.И. Голант. О сопряженных семействах разностных схем для уравнений параболического типа с младшими членами. // ЖВМиМФ, 1978, 18(5), с. 1162-1169.
62. Н.В. Кареткина. Безусловно устойчивая разностная схема для параболических уравнений, содержащих первые производные. // ЖВМиМФ, 1980, 20(1), с. 236-240.
63. А.А. Самарский. Введение в теорию разностных схем. – М., Наука, 1971.
64. Е. Дулан, Дж. Миллер, У. Шилдерс. Равномерные численные методы решения задач с пограничным слоем. – М., Мир, 1983.
65. А.А. Самарский, В.Б. Андреев. Разностные методы для эллиптических уравнений. – М., Наука, 1976.
66. Ю.Н. Карамзин, С.В. Поляков, В.А. Трофимов. Разностные схемы для задач абсорбционной бистабильности в полупроводниках. // Диф. уравнения, 1991, 27(7), с. 1185-1196.
67. Г.И. Марчук. Методы расщепления. – М., Наука, 1988.
68. И.В. Попов, С.В. Поляков. Построение адаптивных нерегулярных треугольных сеток для двумерных многосвязных невыпуклых областей. // Математическое моделирование. 2002, 14(6), с. 25-35.
69. А.А. Самарский, А.В. Колдоба, Ю.А. Повецено, В.Ф. Тишкин, А.П. Фаворский. Разностные схемы на нерегулярных сетках. – Минск, ЗАО «Критерий», 1996.

70. S.N. Atluri, R.H. Gallagher, and O.C. Zienkiewicz (Editors). Hybrid and Mixed Finite Element Methods. – John Wiley & Sons, New York, 1983. – 600 p.
71. *Ando Y., Itoh T.* Calculation of transmission tunneling current across arbitrary potential barriers // *Appl. Phys.* 1987, v.61, № 4, p.1497-1502.
72. *Lui W., Fukuma M.* Exact solution of the Shrodinger equation across an arbitrary one-dimensional picewise-linear potential barrier // *Appl. Phys.* 1986, v.60, № 5, p.1555-1559.
73. Н.Н. Яненко. Введение в теорию разностных схем уравнений математической физики: Курс лекций на физ.-мат. фак. Урал. гос. ун-та. – Б.м.: Б.п., 1958.
74. Н.Н. Яненко. Метод дробных шагов решения многомерных задач математической физики: лекции для студентов НГУ. – Новосибирск, Б.и., 1966.
75. А.Н. Коновалов. Численное решение задач теории упругости. – Новосибирск, Наука, Сиб. отд., 1968.
76. Yu. Saad. Iterative Methods for Sparse Linear Systems. Second edition, 2000.