

ВОЛНЫ В ПЕРИОДИЧЕСКИХ СТРУКТУРАХ С ПОДБАРЬЕРНЫМ ТУННЕЛИРОВАНИЕМ

Проф.А.А. Быков

МГУ имени М.В. Ломоносова, физический факультет, кафедра математики
abykov@yandex.ru

Сформулирована и обоснована математическая модель распространения волн в периодической структуре с подбарьерным туннелированием (ПБТ), основанная на применении метода Галеркина. Модель ПБТ корректна (1) для описания распространения электромагнитных волн в периодической структуре, (2) для электронов в кристаллах, (3) для акустических волн в средах с неконстантной в пространстве плотностью и упругостью. Для определенности, мы в этой работе рассматриваем электромагнитные волны (ЭМВ). Компоненты электромагнитного поля представляются в виде разложения по системе координатных функций. Коэффициенты разложения находятся из задачи на собственные значения или для квадратной матрицы, или для краевой задачи на собственные значения для системы линейных обыкновенных дифференциальных уравнений. Решение задачи о собственных волнах периодической структуры находится из серии нелинейных задач Коши. Построено разложение решения в ряд по степеням малого параметра.

Ключевые слова: периодические структуры, математическое моделирование

DOI: 10.25210/armimp-2022-45

EDN: PDUFAD

Введение

Так как периодическая модель распространения ЭМВ с ПБТ вполне очевидна [1], упомянем о применении модели электронного ПБТ. В настоящее время для диагностики элементного состава поверхности твердых тел применяются ионные пучки (ИП). ИП используются также для модификации свойств поверхности, создания покрытий, в медицине. При взаимодействии пучка ионов с твердым телом происходят упругие (рассеяние ионов пучка, отрыв атомов поверхности, модификация приповерхностной области) и неупругие (электронный обмен, трансформация электронной группировки, эмиссия электронов). Приближение иона к поверхности порождает процесс резонансного электронного туннелирования [2]. В поверхностном слое электрон попадает в кристаллическую трехмерно-периодическую структуру, в которой волновая функция может быть описана нестационарным уравнением Шредингера с периодическим потенциалом:

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(-\frac{\Delta}{2} + U(x, y, z) \right) \psi$$

с некоторыми начальными условиями. Таким образом, имеются два процесса трансформации волновой функции: (1) распространение электронных квазиволн в структуре с периодическим потенциалом, и (2) возбуждение таковых за счет внешнего возмущения полем прибывающего электрона [3]. В данной работе мы рассматриваем первую часть задачи: расчет собственных волн в структуре с периодическим потенциалом. Наша конкретная цель в том, чтобы исследовать модель с наличием поверхностей перемены знака функции $W = E - U(x, y, z)$. При этом возникают волны с комплексным показателем Флоке (затухающие экспоненциально). В случае широкой области инверсии и соответственно малой длины волны, поведение волновой функции вблизи поверхностей нулевого значения W подобно поведению волновой функции одномерной задачи. Это максимум вблизи поверхностей $W = 0$, осцилляции с уменьшающейся амплитудой в разрешенной зоне, экспоненциальное убывание в запрещенной зоне. Нас интересует запрещенная область (с тройной периодичностью) ширина которой сравнима (или в несколько раз больше) длины волны.

Мы рассматриваем скалярную формулировку задачи. Отметим, что скалярная формулировка задачи о 3D-периодических решетках (которую мы рассматриваем в данной работе) имеет значительное количество приложений, в первую очередь в приложении к теории распространения акустических волн.

Математическая модель метода Галеркина. Пусть направления периодичности совпадают с осями (x, y, z) . Для определенности, показатель преломления среды есть периодическая функция координат x, y, z , с периодами соответственно a, b, c . так что диэлектрическая проницаемость удовлетворяет условию

$$\rho(x + na, y + mb, z + kc) = \rho(x, y, z).$$

Тогда бегущие волны можно найти, написав уравнения Максвелла с условиями квазипериодичности (Флоке)

$$u(x + na, y + mb, z + kc) = u(x, y, z) e^{in\mu x + im\nu y + ik\tau c}.$$

Требуется найти такие значения параметра $\lambda = (\mu, \nu, \tau)$, при которых задача для однородных уравнения Максвелла с однородными граничными условиями и с условием Флоке имеет нетривиальное решение. Поле нужной нам пространственной структуры должно быть найдено среди всех возможных решений, и это не обязательно поле с наибольшей или наименьшей фазовой скоростью. Сформулируем метод, основанный на применении метода Галеркина [4] для 3D-периодического волновода. Решение краевой задачи на собственные значения

$$u_{xx} + u_{yy} + u_{zz} - \vartheta^2 u + \kappa^2 \rho(x, y, z)u = 0,$$

$$u(x + na, y + mb, z + kc) = u(x, y, z)e^{in\mu a + im\nu b + ik\tau c},$$

$u(x, y, z, \mu, \nu, \tau) = u^{(M, N, K)}(x, y, z, \mu, \nu, \tau)$, будем искать в виде линейной комбинации функций координатной системы:

$$u(x, y, z, \mu, \nu, \tau) = \sum_{m=-M}^M \sum_{n=-N}^N \sum_{k=-K}^K \phi_n(x, \mu) \psi_m(y, \nu) \chi_k(z, \tau) C_{m,n,k}(\mu, \nu, \tau),$$

где $\phi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} e^{i(\mu + 2\pi n/a)x}$, $\psi_m(y, \nu) = \frac{1}{\sqrt{b}} e^{i(\nu + 2\pi m/b)y}$, $\chi_k(z, \tau) = \frac{1}{\sqrt{c}} e^{i(\tau + 2\pi k/c)z}$. Здесь $\lambda = (\mu, \nu, \tau)$

есть спектральный параметр, подлежащий определению. Мы используем термин координатная система (КС), принятый в классической работе [4]. Соберем все координатные функции в вектор

$$\Xi(x, y, z, \mu, \nu, \tau) = (\phi_{-N}(x, \mu) \psi_{-M}(y, \nu) \chi_{-K}(z, \tau), \dots, \phi_N(x, \mu) \psi_M(y, \nu) \chi_K(z, \tau))^T$$

размера $(2M + 1) \times (2N + 1) \times (2K + 1)$. Теперь приближенное решение можно представить в виде

$u = \Xi^T(x, y, z, \mu, \nu, \tau) \mathbf{C}$, где $\mathbf{C} = (C_{(-M, -N, -K)}, \dots, C_{(M, N, K)})^T$ также вектор-столбец. Все координатные функции в функциональном векторе для $m \in \{-M, \dots, M\}$, $n \in \{-N, \dots, N\}$, $k \in \{-K, \dots, K\}$, упомянуты, порядок их нумерации не важен. Пусть диагональные матрицы $\mathbb{P}$, $\mathbb{Q}$, $\mathbb{R}$ содержат все соответственно первые, вторые элементы и третьи элементы различных троек (m, n, k) натуральных чисел в указанных пределах, перечисленные в произвольном порядке (всего $(2M + 1) \times (2N + 1) \times (2K + 1)$ тройка). Тогда координатную систему можно записать в векторной

форме: $\Xi(x, y, z, \mu, \nu, \tau) = \Phi(x, \mu) \Psi(y, \nu) \Upsilon(z, \tau) \mathbf{J}$, где $\Phi(x, \mu) = \frac{1}{\sqrt{a}} e^{i(\mu + 2\pi \mathbb{Q}/a)x}$,

$\Psi(y, \nu) = \frac{1}{\sqrt{b}} e^{i(\nu + 2\pi \mathbb{P}/b)y}$, $\Upsilon(z, \tau) = \frac{1}{\sqrt{c}} e^{i(\tau + 2\pi \mathbb{R}/c)z}$, $\mathbf{J} = (1, \dots, 1)^T$. Здесь $\Phi(x, \mu)$, $\Psi(y, \nu)$, $\Upsilon(z, \tau)$

квадратные матрицы, число строк и столбцов в которых равно $(2M + 1) \times (2N + 1) \times (2K + 1)$. Если функция $\rho(x, y, 0) = \rho_0$ есть константа, то получим уравнение второго порядка с постоянными коэффициентами

$$u_{xx} + u_{yy} + u_{zz} - \rho^2 u + \kappa^2 \rho_0 u = 0.$$

Поэтому в этом случае

$$\mu_0^2 + \nu_0^2 + \tau_0^2 = \kappa^2 \rho_0 - (2\pi n_0 / a)^2 - (2\pi m_0 / b)^2 - (2\pi k_0 / c)^2.$$

Множество решений дисперсионного уравнения для однородной среды есть, таким образом, сфера в пространстве $\lambda = (\mu, \nu, \tau)$. Для неоднородной среды это будет поверхность, нахождение которой и есть цель нашей работы. После полного описания этой поверхности решение задачи о возбуждении волн внешним полем можно будет найти методом Фурье (это выходит за рамки данной работы). Теперь найдем невязку уравнения Шредингера:

$$R = (-\mathbf{J}^T \Upsilon^T \Psi^T \Phi^T (\tau + 2\pi \mathbb{R} / c)^2 - \mathbf{J}^T \Upsilon^T \Psi^T \Phi^T (\mu + 2\pi \mathbb{Q} / a)^2 - \mathbf{J}^T \Upsilon^T \Psi^T \Phi^T (\nu + 2\pi \mathbb{P} / b)^2 + \kappa^2 \rho \mathbf{J}^T \Upsilon^T \Psi^T \Phi^T) \mathbf{C}.$$

Используя метод Галеркина, получим линейную однородную алгебраическую систему. Умножим невязку слева скалярно на Ξ^* , используем комплексно сопряженные координатные функции, что равносильно умножению на $\Phi^* \Psi^* \Upsilon^* \mathbf{J}$. Используя ортогональность и нормированность

координатной системы, $\int_0^a dx \int_0^b dy \int_0^c dz \Xi^* \Xi^T = I$ (единичная матрица), получим:

$$(-(\tau + 2\pi \mathbb{R} / c)^2 - (\mu + 2\pi \mathbb{Q} / a)^2 - (\nu + 2\pi \mathbb{P} / b)^2 + \kappa^2 < \Xi^* | \rho | \Xi^T >) \mathbf{C} = 0,$$

где $< \Xi^* | \rho | \Xi^T >_{(m', n'), (m, n)}$ есть квадратная матрица размера $(2M + 1) \times (2N + 1) \times (2K + 1)$:

$$< \Xi^* | \rho | \Xi^T >_{(m', n', k'), (m, n, k)} = \int_0^a dx \int_0^b dy \int_0^c dz \psi_{m'}^* \phi_{n'}^* \chi_{k'}^* \rho(x, y, z) \psi_m \phi_n \chi_k.$$

Алгебраическое уравнение, которое определяет λ , равносильно условию равенства нулю определителя квадратной матрицы:

$$\det [-(\mu + 2\pi Q/a)^2 - (\nu + 2\pi P/b)^2 - (\tau + 2\pi R/c)^2 + \kappa^2 < \Xi^* | \rho | \Xi^T >] = 0.$$

Эта задача не может быть решена стандартными методами, которые применяются для решения задачи на собственные значения для квадратной матрицы, так как неизвестный векторный параметр (μ, ν, τ) входит квадратично в эту матрицу. Для рассматриваемой задачи можно записать уравнение в виде

$$[(\mu + 2\pi Q/a)^2 + (\nu + 2\pi P/b)^2 + (\tau + 2\pi R/c)^2] C = \kappa^2 < \Xi^* | \rho | \Xi^T > C$$

и получить таким образом обобщенную задачу на собственные значения для квадратной матрицы. В этом случае мы получим зависимость $\kappa(\mu, \nu, \tau)$.

Численный анализ. Результаты численного анализа будут представлены в презентации.

Асимптотический анализ. Вопреки широко распространенному предубеждению, метод Галеркина удобен не только для численного, но и для асимптотического анализа. Пусть

$$\rho(x, y, z) = \rho_0 + \varepsilon \rho_1(x, y, z),$$

$$\mu = \mu_0 + \varepsilon \mu_1 + \varepsilon^2 \mu_2 + \dots, \quad \nu = \nu_0 + \varepsilon \nu_1 + \varepsilon^2 \nu_2 + \dots, \quad \tau = \tau_0 + \varepsilon \tau_1 + \varepsilon^2 \tau_2 + \dots, \quad C = \dots \quad (\text{аналогично}).$$

Получим систему связанных алгебраических уравнений с вырожденными матрицами, из которых последовательно найдем сначала $(\mu_{j+1}, \dots)$ из условия нетривиальной разрешимости, затем C_{j+1} как решение неоднородной системы с вырожденной матрицей. Решение C_{j+1} неединственно, выбор одного решения из одномерного гиперпространства определяет нормирование. Мы приведем также результаты расчета для нескольких ключевых конфигураций.

Список литературы

1. Ярив А., Юх П. Оптические волны в кристаллах. М.: Мир, 1987.
2. Арсеев П. И., Манцевич В. Н., Маслова Н. С., Панов В. И. Особенности туннельных процессов в полупроводниковых наноструктурах // Успехи физических наук. - 2017. - Т. 187. - N 11. - С. 1147-1168.
3. Gainullin I.K. Three-dimensional modeling of resonant charge transfer between ion beams and metallic surfaces // Physical Review A. - 2017. - V. 95. - N. 5. - P. 052705.
4. Гавурин М.К. Численные методы. М.: Наука, 1971.

WAVES IN PERIODIC STRUCTURES WITH SUB-BARRIER TUNNELING

PhD, Professor, Alexey Bykov

Department of Mathematics, Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University
abykov@yandex.ru

A mathematical model of wave propagation in a periodic structure with sub-barrier tunneling (PBT) based on the application of the Galerkin method is formulated and substantiated. The PBT model is correct (1) for describing the propagation of electromagnetic waves in a periodic structure, (2) for electrons in crystals, (3) for acoustic waves in media with nonconstant density and elasticity in space. For the sake of certainty, in this paper we consider electromagnetic waves (EMW). The components of the electromagnetic field are represented as a decomposition according to a system of coordinate functions. The expansion coefficients are found from the eigenvalue problem or for a square matrix, or for the boundary value eigenvalue problem for a system of linear ordinary differential equations. The solution of the problem of eigenwaves of a periodic structure is found from a series of nonlinear Cauchy problems. A decomposition of the solution in a series by degrees of a small parameter is constructed.

Keywords: periodic structures, mathematical modeling

Быков А.А. Волны в периодических структурах с подбарьерным тунелированием // Труды Российского научно-технического общества радиотехники, электроники и связи имени А.С. Попова: Материалы 15-й Международной научно-технической конференции «Акустооптические и радиолокационные методы измерений и обработки информации», ARMIMP-2022. Астрахань, 03-07.10.2022. ISBN 978-5-905278-52-5. DOI: 10.25210/armimp-2022-45. EDN: PDUFAD

