

[15] Waseda Y.//Progr. Mater. Science. 1981. 26. P. 1—122. [16] Cowlam N., Sakata M., Davies H. A.//J. Phys. F. 1979. 9, N 11. P. L203. [17] Золотухин И. В. Физические свойства аморфных металлических материалов. М., 1986. С. 31—32. [18] Physics and Applications of Invar Alloys/Ed. by H. Saito. Tokyo, 1978; Collins M. F.//Proc. Phys. Soc. 1965. 86. P. 973.

Поступила в редакцию
01.02.88

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3, ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1989. Т. 30, № 3

УДК 517.955.8:537.222.22

ПРИБЛИЖЕННОЕ РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ПУАССОНА В МОДЕЛИ ДВУМЕРНОЙ ПОЛУПРОВОДНИКОВОЙ СТРУКТУРЫ

Л. В. Калачев, И. А. Обухов

(кафедра математики)

Методом пограничных функций построено асимптотическое приближение по малому параметру к решению уравнения Пуассона для электростатического потенциала в прямоугольной области, моделирующей двумерную полупроводниковую структуру.

1. Постановка задачи. Моделирование явлений переноса заряда в полупроводниковых структурах необходимо при решении различных теоретических и прикладных задач. Особенно актуальной является задача численного моделирования процессов, протекающих в полупроводниковых приборах [1, 2].

При описании этих процессов обычно исходят из уравнений хорошо известной дрейфово-диффузионной модели, которые в случае невырожденного полупроводника имеют вид [1, 3]

$$\alpha^2 \Delta \Psi = n - p - N,$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -u_n - \beta^2 \nabla j_n, \quad \frac{\partial p}{\partial t} = -u_p + \beta^2 \nabla j_p,$$

$$j_n = \mu_n n \nabla \Phi_n, \quad j_p = \mu_p p \nabla \Phi_p,$$

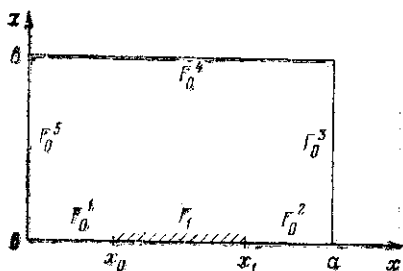
$$j = j_n + j_p + \frac{\alpha^2}{\beta^2} \frac{\partial}{\partial t} (\nabla \Psi),$$

$$n = \exp \{ \Psi - \Phi_n \}, \quad p = \exp \{ \Phi_p - \Psi \}. \quad (1)$$

Система (1) записана в безразмерном виде. Приняты следующие обозначения: $\alpha = L_0/L$, где L_0 — длина Дебая [2, 3], а L — характерный для задачи размер; Ψ — электростатический потенциал, измеряемый в единицах kT/e (k — постоянная Больцмана, T — абсолютная температура, e — заряд электрона); n , p , N — концентрации электронов, дырок и плотность заряда легирующей примеси в единицах собственной концентрации n_i ; $u_n = u_p$ — члены, описывающие процессы генерации — рекомбинации носителей заряда; $\beta^2 = \alpha^2 \tau / \tau_0$, где τ_0 — время диффузии на длину Дебая, а τ — характерное для задачи время; j , j_n , j_p — плотности токов в единицах $j^* = -en_i D_0 / L_0$, D_0 — величина размерности коэффициента диффузии; μ_n и μ_p — подвижности носителей заряда; $\Phi_{n,p}$ — квазиуровни Ферми, измеряемые в тех же единицах, что и Ψ .

Решение существенно нелинейной самосогласованной системы (1) может быть получено методом последовательных приближений. При

этом на каждом шаге сначала решается уравнение для потенциала Ψ , а затем в поле, заданном этим потенциалом, решаются уравнения для n и p . Численное моделирование работы полупроводниковых приборов осложняется тем, что уравнение для Ψ является сингулярно возмущенным [4, 5], так как в него входит малый параметр $\varepsilon = \alpha(\sqrt{m})^{-1} \ll 1$ (здесь $m = \max |N|$). Для современных полупроводниковых приборов $\varepsilon = 10^{-1} \div 10^{-4}$. В данной статье строится асимптотика решения уравнения Пуассона для потенциала Ψ по параметру ε , что позволяет проводить эффективный качественный и количественный анализ решения. Аналогичные исследования проводились в одномерном случае, например в работах [6, 7], в двумерной постановке частный случай нулевых приложенных напряжений изучен в [8].



Задачу будем рассматривать в модельной области $\bar{\Omega}$ (рисунок), имеющей один отрезок границы типа Γ_1 , соответствующей омическому контакту. Для реальных областей, содержащих два и более отрезков границы типа Γ_1 , построение асимптотики проводится аналогично.

Для потенциала Ψ граничные условия имеют вид

$$\frac{\partial \Psi}{\partial \nu} \Big|_{\Gamma_0^i} = 0, \quad \Psi|_{\Gamma_1} = V + \frac{1}{2} \ln \left[\left(\sqrt{\frac{N^2}{4} + 1} + 1 + \frac{N}{2} \right) / \left(\sqrt{\frac{N^2}{4} + 1} - \frac{N}{2} \right) \right],$$

где V — приложенное к границе Γ_1 напряжение, $\partial/\partial \nu$ — производная по направлению внешней нормали к границе.

Решение для Ψ будем искать в виде

$$\Psi = \Psi_0 + \Phi,$$

где

$$\Psi_0 = \frac{1}{2} \Phi + \frac{1}{2} \ln \left[\left(\sqrt{\frac{N^2}{4} + 1} + 1 + y + \frac{N}{2} \right) / \left(\sqrt{\frac{N^2}{4} + 1} + 1 + y - \frac{N}{2} \right) \right]$$

и введены обозначения:

$$\Phi = \Phi_p + \Phi_n, \quad y = np - 1 = \exp \{ \Phi_p - \Phi_n \} - 1.$$

Потенциал Ψ_0 является решением уравнения квазиэлектронейтральности

$$n - p - N = 0.$$

Функция Ψ_0 точно удовлетворяет граничному условию на границе Γ_1 (так как на Γ_1 : $\Phi_n = \Phi_p = V$, $y = 0$) и вносит невязку порядка $O(1)$ в граничные условия на Γ_0 (так как на Γ_0 : $\partial \Phi / \partial \nu = \partial y / \partial \nu = 0$, но $\partial N / \partial \nu \neq 0$). Последнее утверждение на практике нарушается лишь для приборов с полевыми затворами, которые мы здесь не рассматриваем.

Сингулярно возмущенная краевая задача для потенциала φ имеет вид

$$\varepsilon^2 \Delta \varphi = A(x, z) \operatorname{sh} \varphi + B(x, z) (\operatorname{ch} \varphi - 1) - g(x, z, \varepsilon),$$

$$\varphi|_{\Gamma_1} = 0, \quad \left. \frac{\partial \varphi}{\partial \nu} \right|_{\Gamma_0^i} = \chi_i|_{\Gamma_0^i} = - \left. \frac{\partial \Psi_0}{\partial \nu} \right|_{\Gamma_0^i}. \quad (2)$$

Здесь введены обозначения: $A(x, z) = 2\sqrt{N^2/4 + 1 + y/m} \sim O(1)$, $B(x, z) = N/m \sim O(1)$, $g(x, z, \varepsilon) = \varepsilon^2 \Delta \Psi_0$. Заметим, что $A > B$ при всех x и z . Учтем также, что функция $\Delta \Psi_0$ в некоторых подобластях $\bar{\Omega}$ (вблизи α -переходов) может иметь порядок $O(\varepsilon^{-2})$. Будем считать, что $g(x, z, \varepsilon) \sim O(1)$ внутри $\bar{\Omega}$ и $g(x, z, \varepsilon) \sim O(\varepsilon)$ как вблизи, так и на самой границе области $\bar{\Omega}$. Все функции, входящие в (2), считаем достаточно гладкими.

Для обеспечения нужной степени гладкости членов асимптотики наложим следующие условия согласования:

$$\left. \frac{\partial^k \chi_1}{\partial x^k} \right|_{x=x_0} = \left. \frac{\partial^k \chi_2}{\partial x^k} \right|_{x=x_1} = 0, \quad \left. \frac{\partial^{k+l} g}{\partial \varepsilon^l \partial x^k} \right|_{\substack{x=x_0 \\ x=x_1}} = 0, \quad (3)$$

$$k=0, 1, 2, \dots, l=0, 1, 2, \dots,$$

а также естественные условия согласования граничных данных в угловых точках области $\bar{\Omega}$.

2. Алгоритм построения асимптотики. Асимптотическое разложение решения задачи (2) будем строить в виде

$$\varphi(x, z, \varepsilon) = \bar{\varphi}(x, z, \varepsilon) + \Pi(x, \eta, \varepsilon) + Q_1(x, \eta, \varepsilon) + Q_5(\xi, z, \varepsilon) +$$

$$+ Q_4(x, \eta^*, \varepsilon) + Q_3(\xi^*, z, \varepsilon) + Q_2(x, \eta, \varepsilon) + P_1(\xi, \eta, \varepsilon) + P_2(\xi, \eta^*, \varepsilon) +$$

$$+ P_3(\xi^*, \eta^*, \varepsilon) + P_4(\xi^*, \eta, \varepsilon), \quad (4)$$

где $\eta = z/\varepsilon$; $\eta^* = (b-z)/\varepsilon$; $\xi = x/\varepsilon$; $\xi^* = (a-x)/\varepsilon$ — погранслойные переменные; $\bar{\varphi}$ — регулярная часть асимптотики; Π , Q_i ($i=1, 2, \dots, 5$) — обыкновенные, а P_j ($j=1, 2, 3, 4$) — угловые погранфункции [9, 10]. Каждое слагаемое в (4) представляет собой ряд по степеням ε , например

$$\bar{\varphi}(x, z, \varepsilon) = \sum_{i=0}^{\infty} \varepsilon^i \bar{\varphi}_i(x, z).$$

Погранфункции стремятся к нулю при стремлении соответствующих погранслойных переменных к бесконечности.

Обозначим правую часть уравнения из (2) (без $g(x, z, \varepsilon)$) через $f(\varphi, x, z)$:

$$f(\varphi, x, z) = A(x, z) \operatorname{sh} \varphi + B(x, z) (\operatorname{ch} \varphi - 1)$$

и представим f в виде, аналогичном (4):

$$f = \bar{f} + \Pi f + \sum_{i=1}^5 Q_i f + \sum_{j=1}^4 P_j f, \quad (5)$$

где

$$\begin{aligned} \bar{f}(x, z, \varepsilon) &= f(\bar{\varphi}(x, z, \varepsilon), x, z), \\ \Pi f(x, \eta, \varepsilon) &= f(\bar{\varphi}(x, \varepsilon\eta, \varepsilon) + \Pi(x, \eta, \varepsilon), x, \varepsilon\eta) - \bar{f}(x, \varepsilon\eta, \varepsilon), \\ Q_1 f(x, \eta, \varepsilon) &= f(\bar{\varphi}(x, \varepsilon\eta, \varepsilon) + Q_1(x, \eta, \varepsilon), x, \varepsilon\eta) - \bar{f}(x, \varepsilon\eta, \varepsilon), \\ Q_5 f(\xi, z, \varepsilon) &= f(\bar{\varphi}(\varepsilon\xi, z, \varepsilon) + Q_5(\xi, z, \varepsilon), \varepsilon\xi, z) - \bar{f}(\varepsilon\xi, z, \varepsilon), \\ P_1 f(\xi, \eta, \varepsilon) &= f(\bar{\varphi}(\varepsilon\xi, \varepsilon\eta, \varepsilon) + Q_1(\varepsilon\xi, \eta, \varepsilon) + Q_5(\xi, \varepsilon\eta, \varepsilon) + \\ &+ P_1(\xi, \eta, \varepsilon), \varepsilon\xi, \varepsilon\eta) - Q_1 f(\varepsilon\xi, \eta, \varepsilon) - Q_5 f(\xi, \varepsilon\eta, \varepsilon) - \bar{f}(\varepsilon\xi, \varepsilon\eta, \varepsilon). \end{aligned}$$

Для других Q, P -функций — аналогичные выражения.

Подставляя ряды (4), (5) в (2) и приравнивая одностипные слагаемые при одинаковых степенях ε , получим уравнения и дополнительные условия для членов асимптотики. В нулевом приближении по ε для $\bar{\varphi}_0$ имеем уравнение

$$A(x, z) \operatorname{sh} \bar{\varphi}_0 + B(x, z) (\operatorname{ch} \bar{\varphi}_0 - 1) = g(x, z, 0). \quad (6)$$

Так как $A > B$ всюду в $\bar{\Omega}$, то уравнение (6) имеет единственное решение:

$$\bar{\varphi}_0 = \ln \left\{ \frac{B + g(x, z, 0) + \sqrt{(B + g(x, z, 0))^2 + A^2 - B^2}}{A + B} \right\}.$$

Поскольку мы предположили, что $g(x, z, 0)$ на Γ равна нулю, то и $\bar{\varphi}_0|_{\Gamma} = 0$ и, следовательно, все Π, Q и P -функции в нулевом приближении тождественно равны нулю.

Аналогичным образом в первом приближении по ε получим

$$\bar{\varphi}_1 = \ln \left\{ \frac{B + g'_\varepsilon(x, z, 0) + \sqrt{(B + g'_\varepsilon(x, z, 0))^2 + A^2 - B^2}}{A + B} \right\}.$$

Введем обозначение:

$$F(x, z) = A(x, z) \operatorname{ch} \bar{\varphi}_0(x, z) + B(x, z) \operatorname{sh} \bar{\varphi}_0(x, z).$$

Для $\Pi_1(x, \eta)$ имеем задачу:

$$\frac{\partial^2 \Pi_1}{\partial \eta^2} = F(x, 0) \Pi_1, \quad \Pi_1(x, 0)|_{\Gamma_0^1, \Gamma_0^2} = 0, \quad (7)$$

$$\Pi_1(x, 0)|_{\Gamma_1} = -\bar{\varphi}_1(x, 0), \quad \Pi_1(x, \infty) = 0.$$

Отсюда

$$\Pi_1(x, \eta) = \gamma_1 \exp \{ -\sqrt{F(x, 0)} \eta \}, \quad \text{где } \gamma_1(x) = \begin{cases} -\bar{\varphi}_1(x, 0), & x \in \Gamma_1 \\ 0, & x \in \Gamma_0^1 \cup \Gamma_0^2. \end{cases}$$

Для функции Π_1 справедлива экспоненциальная оценка:

$$|\Pi_1(x, \eta)| \leq c_0 \exp(-\kappa\eta), \quad 0 \leq x \leq a, \quad \eta \geq 0 \quad (8)$$

(c_0 и κ — некоторые положительные постоянные).

Отметим, что в силу (3) Π_1 является сколь угодно гладкой в $\bar{\Omega}$ и не вносит невязок в условия на Γ_0^1 и Γ_0^2 .

Для функций $Q_{1,1}(x, \eta)$ и $Q_{5,1}(\xi, z)$ имеем задачи:

$$\frac{\partial^2 Q_{1,1}}{\partial \eta^2} = F(x, 0) Q_{1,1}, \quad Q_{1,1}(x, 0) \Big|_{\Gamma_1, \Gamma_0^2} = 0, \quad (9)$$

$$\frac{\partial Q_{1,1}}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_0^1} = \left(\chi_1(x) - \frac{\partial \bar{\varphi}_0}{\partial z}(x, 0) \right) \Big|_{\Gamma_0^1}, \quad Q_{1,1}(x, \infty) = 0;$$

$$\frac{\partial^2 Q_{5,1}}{\partial \xi^2} = F(0, z) Q_{5,1}, \quad Q_{5,1}(\infty, z) = 0, \quad (10)$$

$$\frac{\partial Q_{5,1}}{\partial \xi} \Big|_{\xi=0} = \left(\chi_5(z) - \frac{\partial \bar{\varphi}_0}{\partial x}(0, z) \right).$$

Отсюда

$$Q_{1,1} = - \frac{\gamma_2(x)}{\sqrt{F(x, 0)}} \exp \{ -\sqrt{F(x, 0)} \eta \},$$

$$Q_{5,1} = - \frac{\chi_5 - \frac{\partial \bar{\varphi}_0}{\partial x}(0, z)}{\sqrt{F(0, z)}} \exp \{ -\sqrt{F(0, z)} \xi \},$$

где

$$\gamma_2(x) = \begin{cases} \chi_1(x) - \frac{\partial \bar{\varphi}_0}{\partial z}(x, 0), & x \in \Gamma_0^1, \\ 0, & x \in \Gamma_1 \cup \Gamma_0^2. \end{cases}$$

Остальные Q -функции в первом приближении строятся аналогично. В силу условий (3) Q -функции являются сколь угодно гладкими в $\bar{\Omega}$ и для них справедливы оценки, аналогичные (8). Нетрудно убедиться, что в первом порядке по ε все P -функции тождественно равны нулю.

При выполнении условий (3) построение асимптотики может быть продолжено до любого порядка по ε . При этом Π , Q -функции определяются из линейных обыкновенных дифференциальных уравнений, аналогичных (7), (9), (10), с неоднородностями, имеющими оценки типа (8). Очевидно, что Π , Q -функции имеют такие же оценки.

Угловые погранфункции не равны нулю начиная со второго порядка по ε . Они устраняют невязки в граничных условиях вблизи вершин прямоугольника $\bar{\Omega}$, вносимые Π , Q -функциями. Определяются P -функции стандартным образом [9, 10] как решения линейных эллиптических уравнений с постоянными коэффициентами. Выпишем здесь оценку для $P_{1,i}(\xi, \eta)$ ($i \geq 2$):

$$|P_{1,i}(\xi, \eta)| \leq c_0 \exp \{ -\kappa(\xi + \eta) \}, \quad \xi \geq 0, \eta \geq 0.$$

Для остальных P -функций имеют место аналогичные оценки.

Используя результаты работ [9, 11, 12], можно показать, что при достаточно малых ε существует единственное решение задачи (2), причем частичная сумма ряда (4) k -го порядка является равномерным в $\bar{\Omega}$ приближением для этого решения с точностью $O(\varepsilon^{k+1})$.

3. Заключение. В данной работе показано, каким образом может быть построено приближенное решение уравнения Пуассона для электростатического потенциала Ψ в модели двумерной полупроводниковой структуры. При построении асимптотики использовались методы теории сингулярных возмущений [4, 9, 10].

Полученное асимптотическое разложение находит применение при исследовании процессов переноса заряда в полупроводниках. В частности, как показали численные расчеты на ЭВМ, использование асимптотики в качестве начального приближения ускоряет сходимость разностных алгоритмов решения системы (1) в $5 \div 10$ раз. Полученные здесь выражения позволяют аналитически исследовать целый ряд задач физики полупроводниковых приборов. Асимптотики достаточно хорошо описывают решение задачи как в квазиэлектронейтральных областях, так и в областях пространственного заряда.

В заключение авторы выражают благодарность В. Ф. Бутузову за внимание к работе и полезные обсуждения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Энгль В. Л., Диркс Х. К., Майнерцхаген Б. // ТИИЭР. 1983. 71, № 1. С. 14. [2] Зи С. Физика полупроводниковых приборов. М. 1984. Т. 1, 2. [3] Бонч-Бруевич В. Л., Калашников С. Г. Физика полупроводников. М., 1977. [4] Васильева А. Б., Бутузов В. Ф. Сингулярно возмущенные уравнения в критических случаях. М., 1978. [5] Васильева А. Б., Стельмах В. Г. // ЖВМ и МФ. 1977. 17, № 2. С. 339. [6] Markowich P. A., Ringhofer C. A. // J. Appl. Math. 1984. 44, N 2. P. 231. [7] Белянин М. П. // ЖВМ и МФ. 1986. 26, № 2. С. 306. [8] Markowich P. A. The Stationary Semiconductor Device Equations. Springer-Verlag Wien. N. Y., 1985. [9] Бутузов В. Ф. // Дифф. уравнения. 1973. 9, № 9. С. 1654. [10] Бутузов В. Ф. // Дифф. уравнения. 1979. 15, № 10. С. 1848. [11] Protter M. H., Weinberger H. Maximum principles in differential equations. Englewood Cliffs, N. J.: Prentice-Hall. 1967. [12] Вольперт К. И., Худяев С. И. Анализ в классах разрывных функций и уравнения математической физики. М., 1975.

Поступила в редакцию
11.03.88

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3, ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1989. Т. 30, № 3

УДК 537.324

АНОМАЛЬНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ЭДС ХОЛЛА И ТЕРМОЭДС ОТ МАГНИТНОГО ПОЛЯ В p - Bi_2Te_3

В. А. Кульбачинский, Н. Е. Клокова, С. Я. Скипидаров, Я. Горак (ЧССР),
П. Лощяк (ЧССР), С. А. Азоу (Ирак)

(кафедра физики низких температур)

Обнаружены осцилляции холловского напряжения у монокристаллов p - Bi_2Te_3 , имеющие вид серии плато. Квантование эффекта Холла вызвано стабилизацией уровня Ферми в примесной зоне, расположенной над потолком зоны тяжелых дырок в $\text{Bi}_2\text{Te}_3(\text{Sn})$.

1. Теллурид висмута представляет собой полупроводник из группы кристаллов типа A_2B_3 и имеет тип симметрии $D_{3d}^5(R3m)$. Кристаллическая структура Bi_2Te_3 образована повторением пятислойных пакетов из атомов Bi и теллура. Ширина непрямо́й запрещенной зоны в Bi_2Te_3 составляет $\sim 0,15$ эВ [1]. При концентрации дырок менее $5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ холловская концентрация носителей тока совпадает с определенной по эффекту Шубникова—де Гааза с учетом того, что поверхность Ферми p - Bi_2Te_3 состоит из шести эллипсоидов, центрированных в зеркальных плоскостях симметрии, с углом наклона по отношению к биссекторной оси C_1 приблизительно 30° [2].