

Решение краевой задачи для равновесного плавного $n-n^+$ -перехода с помощью интерполяционного метода

А.С. Арефьев

Поволжский государственный университет телекоммуникаций и информатики
443010, Российская Федерация, г. Самара
ул. Л. Толстого, 23

С помощью интерполяционного метода решения дифференциальных уравнений получены распределения напряженности электрического поля и концентраций свободных носителей заряда в равновесном плавном $n-n^+$ -переходе.

Ключевые слова: полупроводник, $n-n^+$ -переход, состояние равновесия, интерполяционный метод решения дифференциального уравнения, электрон проводимости, дырка, плазма полупроводника.

1. Постановка задачи

Рассмотрим слой полупроводника толщиной a . Направим ось x декартовой системы координат перпендикулярно его границам. Будем предполагать, что в кристалле присутствует донорная примесь, причем концентрация ионов донорных атомов N_d является функцией x .

В состоянии равновесия токи дрейфа и диффузии электронов проводимости в полупроводнике компенсируют друг друга

$$j_e = e\mu_e n_e E + eD_e \frac{dn_e}{dx} = 0. \quad (1)$$

Здесь j_e и E – x -компоненты плотности тока свободных электронов и напряженности внутреннего электрического поля в полупроводнике; n_e – концентрация электронов проводимости; e – абсолютное значение заряда электрона. Коэффициент диффузии D_e и подвижность μ_e свободных электронов связаны соотношением Эйнштейна [1]

$$D_e = \frac{kT}{e} \mu_e, \quad (2)$$

где k – постоянная Больцмана; T – абсолютная температура полупроводника.

Третье уравнение Максвелла может быть записано следующим образом

$$\frac{dE}{dx} = \frac{e}{\epsilon_0 \epsilon} [-n_e + n_h + N_d(x)]. \quad (3)$$

Здесь n_h – концентрация дырок; ϵ_0 – электрическая постоянная; ϵ – относительная диэлектрическая проницаемость полупроводника. В состоянии равновесия справедливо соотношение

$$n_h = n_i^2 / n_e, \quad (4)$$

где n_i – концентрация электронов проводимости в полупроводнике i -типа.

Введем обозначения:

$$\tilde{E} = \frac{ea}{kT} E, \quad \tilde{n}_e = qn_e, \quad \tilde{n}_h = qn_h, \quad (5)$$

$$\tilde{n}_i = qn_i, \quad \tilde{N}_d = qN_d.$$

Нормировочный множитель для концентраций заряженных частиц в кристалле

$$q = \frac{e^2 a^2}{kT \epsilon_0}.$$

С учетом (2), (4), (5) уравнения (1), (3) принимают вид

$$\frac{d\tilde{n}_e}{d\tilde{x}} = -\tilde{n}_e \tilde{E}, \quad (6)$$

$$\frac{d\tilde{E}}{d\tilde{x}} = \frac{1}{\epsilon} \left[-\tilde{n}_e + \frac{\tilde{n}_i^2}{\tilde{n}_e} + \tilde{N}_d(\tilde{x}) \right], \quad (7)$$

где $\tilde{x} = x/a$. На поверхностях полупроводникового кристалла, как и во внешнем пространстве, напряженность внутреннего электрического поля равна нулю. Это дает граничные условия

$$\tilde{E}(0) = \tilde{E}(1) = 0 \quad (8)$$

для системы дифференциальных уравнений (6), (7). Равенства (8) вместе с уравнением Максвелла (3) приводят к условию электрической нейтральности полупроводника

$$\int_0^a \rho(x) dx = 0,$$

где

$$\rho = e(-n_e + n_h + N_d)$$

– плотность заряда в кристалле.

2. Интерполяционный метод решения дифференциального уравнения

Для решения краевой задачи (6)–(8) воспользуемся интерполяционным методом с переменным шагом. При использовании постоянного шага данный метод изложен в [2].

В случае интерполяции по двум и трем точкам применимы многочлены Ньютона первого и второго порядка [3]

$$Z^{(1)}(x) = z_0 + \Delta_1(x_0, x_1)(x - x_0),$$

$$Z^{(2)}(x) = Z^{(1)}(x) + \Delta_2(x_0, x_1, x_2)(x - x_0)(x - x_1).$$

Здесь $\Delta_1(x_0, x_1)$ и $\Delta_2(x_0, x_1, x_2)$ – разделенные разности, определяемые равенствами:

$$\Delta_1(x_0, x_1) = (z_1 - z_0)(x_1 - x_0)^{-1},$$

$$\begin{aligned} \Delta_2(x_0, x_1, x_2) &= (x_2 - x_0)^{-1} \times \\ &\times [\Delta_1(x_1, x_2) - \Delta_1(x_0, x_1)] = \\ &= z_0(x_1 - x_0)^{-1}(x_2 - x_0)^{-1} + \\ &+ z_1(x_0 - x_1)^{-1}(x_2 - x_1)^{-1} + \\ &+ z_2(x_0 - x_2)^{-1}(x_1 - x_2)^{-1}. \end{aligned}$$

Интерполяционные многочлены $Z^{(1)}(x)$, $Z^{(2)}(x)$ удовлетворяют условиям:

$$Z^{(Q)}(x_j) = z_j, \quad (Q = 1, 2; j = 0, 1, \dots, Q).$$

Рассмотрим дифференциальное уравнение первого порядка

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y). \quad (9)$$

Разобьем область определения неизвестной функции $y(x)$ на M интервалов (x_m, x_{m+1}) , $(m = 0, 1, \dots, M-1)$, в общем случае имеющих различную длину. Проинтегрируем уравнение (9) на интервале (x_m, x_{m+1})

$$y_{m+1}^{(Q)} = y_m^{(Q)} + \int_{x_m}^{x_{m+1}} f[x, y(x)] dx,$$

$$(Q = 1, 2; m = Q - 1, Q, \dots, M - 1).$$

Подставим вместо функции $f[x, y(x)]$ интерполяционные многочлены Ньютона первого и второго порядка

$$\begin{aligned} F_m^{(1)}(x) &= f_m^{(1)} - \left[f_m^{(1)}(x_{m+1} - x_m)^{-1} + \right. \\ &+ \left. f_{m+1}^{(1)}(x_m - x_{m+1})^{-1} \right] (x - x_m), \end{aligned}$$

$$(x_m < x < x_{m+1}), \quad (m = 0, 1, \dots, M - 1),$$

$$\begin{aligned} F_m^{(2)}(x) &= f_{m-1}^{(2)} - \left[f_{m-1}^{(2)}(x_m - x_{m-1})^{-1} + \right. \\ &+ \left. f_m^{(2)}(x_{m-1} - x_m)^{-1} \right] (x - x_{m-1}) + \\ &+ \left[f_{m-1}^{(2)}(x_m - x_{m-1})^{-1}(x_{m+1} - x_{m-1})^{-1} + \right. \\ &+ \left. f_m^{(2)}(x_{m-1} - x_m)^{-1}(x_{m+1} - x_m)^{-1} + \right. \\ &+ \left. f_{m+1}^{(2)}(x_{m-1} - x_{m+1})^{-1}(x_m - x_{m+1})^{-1} \right] \times \\ &\times (x - x_{m-1})(x - x_m), \end{aligned}$$

$$(x_{m-1} < x < x_{m+1}), \quad (m = 1, 2, \dots, M - 1),$$

где

$$f_m^{(Q)} = f[x_m, y^{(Q)}(x_m)],$$

$$(Q = 1, 2; m = Q - 1, Q, \dots, M).$$

В результате получаем следующие рекуррентные соотношения для определения значений неизвестной функции в точках x_m :

$$\begin{aligned} y_{m+1}^{(Q)} &= y_m^{(Q)} + A_m^{(Q)} f_{m+1}^{(Q)} + B_m^{(Q)}, \\ (Q = 1, 2; m = Q - 1, Q, \dots, M - 1). \end{aligned} \quad (10)$$

Здесь использованы следующие обозначения:

$$y_m^{(Q)} = y(x_m), \quad (Q = 1, 2; m = 0, 1, \dots, M),$$

$$A_m^{(1)} = \frac{1}{2}(x_{m+1} - x_m),$$

$$B_m^{(1)} = \frac{1}{2} f_m^{(1)}(x_{m+1} - x_m),$$

$$(m = 0, 1, \dots, M),$$

$$\begin{aligned} A_m^{(2)} &= (x_{m+1} - x_{m-1})^{-1}(x_{m+1} - x_m) \times \\ &\times \left(\frac{1}{3} x_{m+1} + \frac{1}{6} x_m - \frac{1}{2} x_{m-1} \right), \end{aligned} \quad (11)$$

$$B_m^{(2)} = -\frac{1}{6} f_{m-1}^{(2)}(x_m - x_{m-1})^{-1}(x_{m+1} - x_{m-1})^{-1} \times$$

$$\begin{aligned} &\times (x_{m+1} - x_m)^3 + f_m^{(2)}(x_m - x_{m-1})^{-1} \times \\ &\times (x_{m+1} - x_m) \left(\frac{1}{6} x_{m+1} + \frac{1}{3} x_m - \frac{1}{2} x_{m-1} \right), \end{aligned}$$

$$(m = 1, 2, \dots, M).$$

В случае равномерного разбиения области определения неизвестных функций

$$x_m = m\Delta, \quad (m = 0, 1, \dots, M),$$

$$\Delta = (x_M - x_0) / M$$

равенства (10) переходят в интерполяционные формулы Адамса [2]

$$y_{m+1}^{(1)} = y_m^{(1)} + \frac{\Delta}{2} (f_m^{(1)} + f_{m+1}^{(1)}),$$

$$(m = 0, 1, \dots, M - 1),$$

$$y_{m+1}^{(2)} = y_m^{(2)} + \frac{\Delta}{12} \left(-f_{m-1}^{(2)} + 8f_m^{(2)} + 5f_{m+1}^{(2)} \right),$$

$$(m = 1, 2, \dots, M-1).$$

3. Решение краевой задачи интерполяционным методом

В случае дифференциальных уравнений (6), (7) соотношения (10) записываются следующим образом:

$$\tilde{n}_{e,m+1}^{(Q)} = \tilde{n}_{e,m}^{(Q)} - A_m^{(Q)} \tilde{n}_{e,m+1}^{(Q)} \tilde{E}_{m+1}^{(Q)} + B_{n,m}^{(Q)}, \quad (12)$$

$$(Q = 1, 2; m = Q-1, Q, \dots, M-1),$$

$$\tilde{E}_{m+1}^{(Q)} = \tilde{E}_m^{(Q)} + A_m^{(Q)} \frac{1}{\varepsilon} \left(-\tilde{n}_{e,m+1}^{(Q)} + \frac{\tilde{n}_i^2}{\tilde{n}_{e,m+1}^{(Q)}} + \tilde{N}_{d,m+1} \right) + B_{E,m}^{(Q)}, \quad (13)$$

$$(Q = 1, 2; m = Q-1, Q, \dots, M-1).$$

Величины $A_m^{(Q)}$, $B_{n,m}^{(Q)}$, $B_{E,m}^{(Q)}$, ($Q = 1, 2; m = 1, 2, \dots, M-1$) определяются равенствами (11), в которых следует положить

$$f_m^{(Q)} = f_{n,m}^{(Q)} = f_n \left(\tilde{n}_{e,m}^{(Q)}, \tilde{E}_m^{(Q)} \right),$$

$$f_m^{(Q)} = f_{E,m}^{(Q)} = f_E \left(\tilde{x}_m, \tilde{n}_{e,m}^{(Q)} \right),$$

$$(Q = 1, 2; m = 1, 2, \dots, M-1),$$

$$f_n \left(\tilde{n}_e, \tilde{E} \right) = -\tilde{n}_e \tilde{E},$$

$$f_E \left(\tilde{x}, \tilde{n}_e \right) = \frac{1}{\varepsilon} \left[-\tilde{n}_e + \frac{\tilde{n}_i^2}{\tilde{n}_e} + \tilde{N}_d \left(\tilde{x} \right) \right].$$

Выражая $\tilde{E}_{m+1}^{(Q)}$ из (12), имеем

$$\tilde{E}_{m+1}^{(Q)} = \frac{\tilde{n}_{e,m}^{(Q)} + B_{n,m}^{(Q)} - \tilde{n}_{e,m+1}^{(Q)}}{A_m^{(Q)} \tilde{n}_{e,m+1}^{(Q)}}, \quad (14)$$

$$(Q = 1, 2; m = Q-1, Q, \dots, M-1).$$

Подстановка (14) в (13) приводит к квадратному уравнению относительно неизвестной $\tilde{n}_{e,m+1}^{(Q)}$. Его решения имеют вид:

$$\tilde{n}_{e,m+1}^{(Q)} = \left[2 \left(A_m^{(Q)} \right)^2 \right]^{-1} \times$$

$$\times \left\{ \varepsilon + A_m^{(Q)} \left[\varepsilon \left(\tilde{E}_m^{(Q)} + B_{E,m}^{(Q)} \right) + A_m^{(Q)} \tilde{N}_{d,m+1} \right] \pm \right.$$

$$\left. \pm \left[\left(\varepsilon + A_m^{(Q)} \left[\varepsilon \left(\tilde{E}_m^{(Q)} + B_{E,m}^{(Q)} \right) + A_m^{(Q)} \tilde{N}_{d,m+1} \right] \right)^2 - \right. \right. \quad (15)$$

$$\left. \left. - 4 \left(A_m^{(Q)} \right)^2 \left[\varepsilon \left(\tilde{n}_{e,m}^{(Q)} + B_{n,m}^{(Q)} \right) - \left(A_m^{(Q)} \right)^2 \tilde{n}_i^2 \right] \right]^{1/2} \right\},$$

$$(Q = 1, 2; m = Q-1, Q, \dots, M-1).$$

Граничное условие (8) в точке $\tilde{x} = 0$ дает

$$\tilde{E}_0 = \tilde{E}_0^{(1)} = \tilde{E}_0^{(2)} = 0.$$

Представленные ниже решения краевой задачи соответствуют первому из выражений (15), которое содержит знак «плюс» перед квадратным корнем.

Алгоритм решения краевой задачи может быть построен следующим образом. Сначала задается произвольное значение нормированной концентрации электронов проводимости в точке $\tilde{x} = 0$

$$\tilde{n}_{e,0} = \tilde{n}_{e,0}^{(1)}.$$

Затем определяются величины $\tilde{n}_{e,1} = \tilde{n}_{e,1}^{(1)}$ и $\tilde{E}_1 = \tilde{E}_1^{(1)}$ по формулам (15), (14). Полагая

$$\tilde{n}_{e,1}^{(2)} = \tilde{n}_{e,1}^{(1)}, \quad \tilde{E}_1^{(2)} = \tilde{E}_1^{(1)},$$

можно выразить значения $\tilde{n}_{e,m} = \tilde{n}_{e,m}^{(2)}$, $\tilde{E}_m = \tilde{E}_m^{(2)}$ неизвестных функций в точках \tilde{x}_m , ($m = 2, 3, \dots, M$), каждое из которых, очевидно, является функцией переменной $\tilde{n}_{e,0}$. Граничное условие (8) в точке $\tilde{x} = 1$ дает уравнение для определения $\tilde{n}_{e,0}$

$$\tilde{E}_M \left(\tilde{n}_{e,0} \right) = 0.$$

Решив его, следует повторить описанную выше процедуру для отыскания истинных значений нормированных концентрации электронов проводимости $\tilde{n}_{e,m}$ и напряженности внутреннего электрического поля \tilde{E}_m в точках \tilde{x}_m , ($m = 1, 2, \dots, M$).

4. Результаты расчетов

При выполнении расчетов выбирались следующие числовые значения параметров. Толщина слоя полупроводника $a = 0,1$ мм; относительная диэлектрическая проницаемость полупроводника $\varepsilon = 12,5$ (материал полупроводника – кремний); температура кристалла $T = 300$ К; концентрация электронов проводимости в кремнии i -типа $n_i = 1,45 \cdot 10^{16} \text{ м}^{-3}$. Предполагалось, что концентрация донорных ионов в n - n^+ -переходе распределена по закону

$$N_d(x) = N_0 + N_1 \exp \left[- \left(\frac{a-x}{\xi} \right)^2 \right],$$

где $N_0 = 10^{22} \text{ м}^{-3}$, $N_1 = 10^{23} \text{ м}^{-3}$, $\xi = 10$ мкм. Под границей раздела n - и n^+ -областей понималась плоскость $x = x_{\text{гр}}$, на которой переменная составляющая функции $N_d(x)$ оказывается в $\alpha = 10^3$ раз меньше своего максимального значения N_1 . Исходя из условия

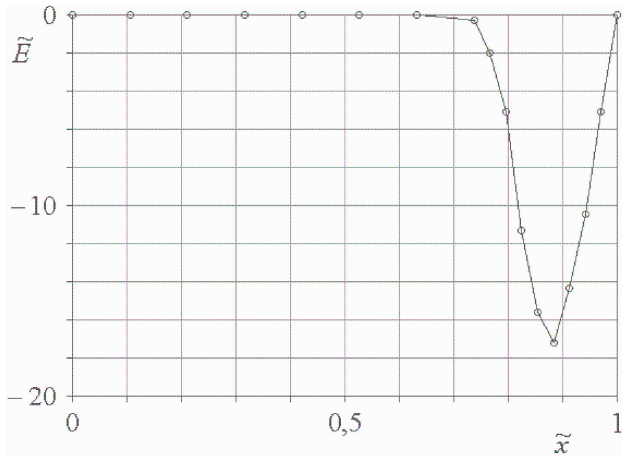


Рис. 1

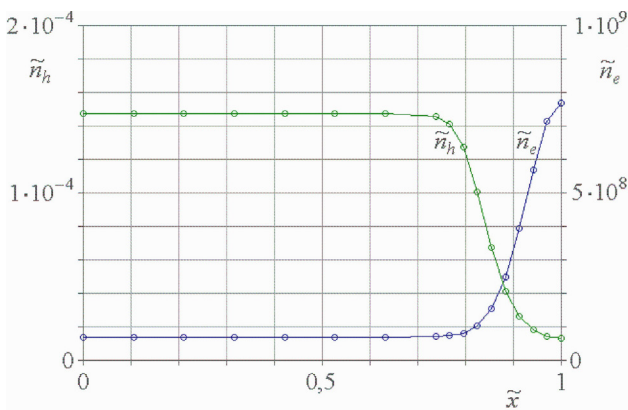


Рис. 2

$$\exp\left[-\left(\frac{a-x_{\text{гр}}}{\xi}\right)^2\right] = \frac{1}{\alpha},$$

имеем

$$x_{\text{гр}} = a - \xi\sqrt{\ln \alpha},$$

или

$$\tilde{x}_{\text{гр}} = 1 - \tilde{\xi}\sqrt{\ln \alpha},$$

где $\tilde{x}_{\text{гр}} = x_{\text{гр}} / a$, $\tilde{\xi} = \xi / a$. В процессе реализации интерполяционного алгоритма интервалы $(0 < \tilde{x} < \tilde{x}_{\text{гр}})$ и $(\tilde{x}_{\text{гр}} < \tilde{x} < 1)$, соответствующие n - и n^+ -областям, разбивались на M и $M^{(+)}$ равных отрезков длиной $\Delta = \tilde{x}_{\text{гр}} / M$ и $\Delta^{(+)} = (1 - \tilde{x}_{\text{гр}}) / M^{(+)}$. Этим обусловлена необходимость использования интерполяционных формул с переменным шагом.

На рис. 1 изображено распределение нормированной напряженности внутреннего электрического поля в $n-n^+$ -переходе. Здесь количество разбиений n - и n^+ -областей составляет: $M = 7$, $M^{(+)} = 9$. Экстремум функции $\tilde{E}(\tilde{x})$ локализован вблизи максимума производной $d\tilde{N}_d / d\tilde{x}$.

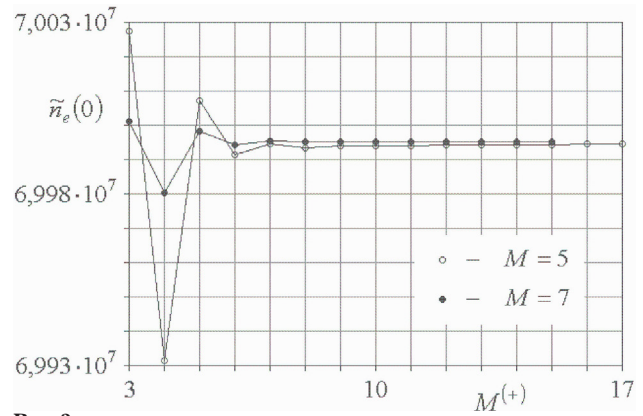


Рис. 3

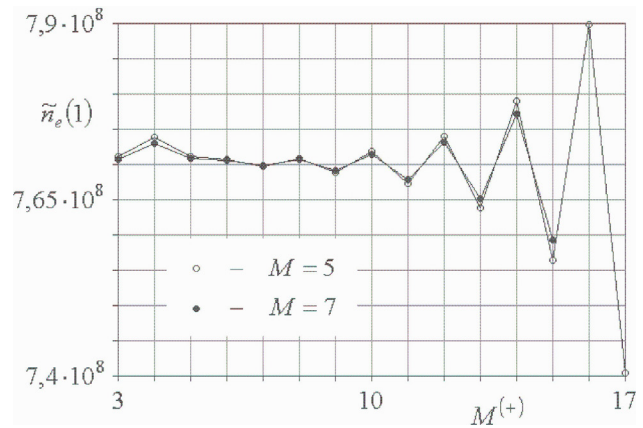


Рис. 4

Координатные зависимости нормированных концентраций электронов проводимости \tilde{n}_e и дырок \tilde{n}_h представлены на рис. 2. Следует отметить, что при выбранных числовых значениях параметров функция $\tilde{n}_e(\tilde{x})$ с достаточно высокой точностью совпадает с распределением нормированной концентрации донорных ионов в полупроводнике $\tilde{N}_d(\tilde{x})$.

Рис. 3 и 4 представляют собой диаграммы сходимости последовательностей приближенных значений нормированной концентрации электронов проводимости \tilde{n}_e на поверхностях слоя полупроводника $\tilde{x} = 0$ и $\tilde{x} = 1$. Здесь количество разбиений n -области остается фиксированным ($M = 5$ или $M = 7$); количество разбиений n^+ -области $M^{(+)}$ варьируется. Начиная с некоторого значения параметра $M^{(+)}$, решение краевой задачи найти не удастся. Корни $\tilde{n}_{e,m}^{(2)}$ квадратного уравнения, определяемые равенствами (15), становятся комплексными. В случае $M = 5$ и $M = 7$ это происходит соответственно при $M^{(+)} = 18$ и $M^{(+)} = 16$.

Список литературы

1. Владимиров В.В., Волков А.Ф., Мейлихов Е.З. Плазма полупроводников. М.: Атомиздат, 1979. 256 с.
2. Березин И.С., Жидков Н.П. Методы вычислений. Т. 2. М.: ГИФМЛ, 1962. 638 с.
3. Корн Г., Корн Т. Справочник по математике для научных работников и инженеров. М.: Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1970. 720 с.

Solution of a boundary-value problem for an equilibrium smooth $n-n^+$ -transition by means of an interpolation method

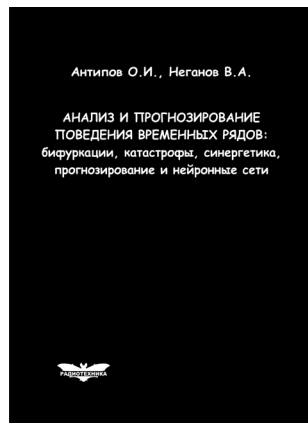
A.S. Aref'ev

Distributions of an electric field strength and free carriers of a charge concentrations in an equilibrium smooth $n-n^+$ -transition are obtained by means of an interpolation method of a differential equations solution.

Keywords: semiconductor, $n-n^+$ -transition, equilibrium, interpolation, conductance electron, hole, semiconductor plasma.

Антипов, О.И.

Анализ и прогнозирование поведения временных рядов: бифуркации, катастрофы, синергетика, фракталы и нейронные сети / О.И. Антипов, В.А. Неганов. – М.: Радиотехника, 2011. – 350 с. ISBN 978-5-88070-294-7



УДК 530.1:621.372+621.396

ББК 32.96

Монография посвящена объединению нескольких направлений в науке: бифуркаций в нелинейных динамических (или детерминированных) системах, причем внимание уделяется бифуркациям-кризисам, которые отождествляются с катастрофами в синергетике – науке о самоорганизации в сложных системах, где велика роль коллективных, кооперативных эффектов, возникновения порядка – фрактальных структур в турбулентности (или хаосе). В синергетике общим является принцип подчинения, который позволяет исключать большое число переменных в сложных системах и описывать в них сложные процессы. Использование в роли одной из основных количественных характеристик катастроф фрактального показателя Херста связывает фракталы с бифуркациями. Объединение этих четырех направлений позволяет упростить проектирование прогнозирующих нейронных сетей, которое в настоящее время отчасти является искусством.

Даны авторские модификации некоторых известных фрактальных методов, позволяющие проводить более глубокий анализ хаотических процессов. Эти результаты, на наш взгляд, должны являться необходимой частью полного алгоритма построения прогностических моделей, описанного в книге. В частности, описан авторский алгоритм определения временного лага, необходимого для реконструкции аттрактора динамической системы и модификация метода ближайших ложных соседей, которую можно использовать в качестве индикатора приближающейся катастрофы.

Приведены конкретные примеры из таких областей науки, как радиотехника, экономика и медицина.

Монография представляет интерес для научных работников, аспирантов и докторантов, работающих в области прикладных задач анализа, моделирования и прогнозирования хаотических процессов в нелинейных системах из различных отраслей науки и техники.