

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПОТЕНЦИАЛА В ПЛАСТИНАХ АНИЗОТРОПНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

© М.Ю. Хухрянский

Воронежский государственный университет,
394693 Воронеж, Россия
(Получена 27 марта 1995 г. Принята к печати 18 сентября 1995 г.)

Реализован метод конформных отображений для решения краевой задачи по распределению потенциала в плоском прямоугольном анизотропном образце, ориентированном под углом к главным осям тензора электропроводности. Решение получено в параметрической форме, в виде двух интегралов Кристоффеля-Шварца. Результаты численного расчета хорошо согласуются с экспериментальными данными.

Задача моделирования кинетических явлений в низкоразмерных системах весьма актуальна. Токотрохождение в таких системах определяется особенностями распределения потенциала. Одним из наиболее мощных методов моделирования распределения потенциала в двухмерном случае является метод конформных отображений. Суть этого метода заключается в том, что область определения соответствующей краевой задачи конформно отображается на некоторую область (круг, квадрат, полуплоскость), для которой решение может быть найдено относительно просто. Важно отметить, что уравнение Лапласа инвариантно относительно такого преобразования [1].

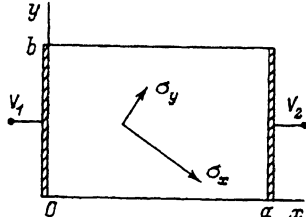
В настоящей работе методом конформных отображений получено распределение потенциала в плоском анизотропном образце прямоугольной формы, вырезанном под углом к главным осям тензора электропроводности, со сплошными омическими контактами (рис. 1).

В случае однородного полупроводника двумерное уравнение непрерывности плотности тока с учетом потенциальности электрического поля и симметричности тензора электропроводности ($\sigma_{xy} = \sigma_{yx}$) запишем в виде

$$\sigma_{xx} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + 2\sigma_{xy} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x \partial y} + \sigma_{yy} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} = 0, \quad (1)$$

где φ — электростатический потенциал, σ_{xx} , σ_{xy} , σ_{yy} — компоненты тензора электропроводности. На свободных сторонах прямоугольника

Рис. 1. Анизотропный образец со сплошными омическими контактами.



нормальная составляющая плотности тока равна нулю, тогда

$$\left(\sigma_{xy} \frac{\partial \varphi}{\partial x} + \sigma_{yy} \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) \Big|_{y=0, y=b} = 0, \quad (2)$$

где b — ширина образца. Омические контакты считаем эквипотенциальными

$$\varphi = \begin{cases} V_1, & x = 0, \\ V_2, & x = a, \end{cases} \quad (3)$$

где a — длина образца.

Приведем уравнение (1) к каноническому виду. Используем для этого следующее аффинное преобразование:

$$\xi = x - \frac{\sigma_{xy}}{\sigma_{yy}} y, \quad \eta = \frac{\gamma}{\sigma_{yy}} y, \quad \gamma = (\sigma_{xx}\sigma_{yy} - \sigma_{xy}^2)^{1/2}. \quad (4)$$

В новых координатах краевая задача (1)–(3) записывается следующим образом:

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial \xi^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \eta^2} = 0, \quad (5)$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial \eta} = 0, \quad \eta = 0, \quad \eta = \frac{\gamma}{\sigma_{yy}} b, \quad (6)$$

$$\varphi = \begin{cases} V_1, & \xi + \frac{\sigma_{xy}}{\gamma} \eta = 0, \\ V_2, & \xi + \frac{\sigma_{xy}}{\gamma} \eta = a. \end{cases} \quad (7)$$

Причем областью определения задачи (5)–(7) является параллелограмм. Таким образом, необходимо найти гармоническую функцию, удовлетворяющую на параллелограмме смешанным граничным условиям.

Используя дополнительное конформное преобразование, отображающее параллелограмм на верхнюю полуплоскость $\text{Im } z > 0$ комплексной плоскости $z = u + iv$, перейдем к новой краевой задаче

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial u^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial v^2} = 0, \quad (8)$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial v} \Big|_{v=0} = 0, \quad u \in]-\infty, a_1[\cup]b_1, a_2[\cup]b_2, +\infty[, \quad (9)$$

$$\varphi = \begin{cases} V_1, & u \in]a_1, b_1[, v = 0, \\ V_2, & u \in]a_2, b_2[, v = 0, \end{cases} \quad (10)$$

где a_1, b_1, a_2, b_2 — образы вершин параллелограмма, принадлежащие действительной оси $v = 0$. Решение краевой задачи (8)–(10) найдем, применяя теорему Келдыша–Седова [1]. Для этого введем аналитическую функцию $\Phi(z) = \varphi(z) + i\psi(z)$ ($\psi(z)$ — сопряженная гармоническая функция). Дифференцируя $\Phi(z)$, получим

$$f(z) = \Phi'(z) = \frac{\partial \varphi}{\partial u} + i \frac{\partial \varphi}{\partial v}, \quad (11)$$

$$f_1(u) = \operatorname{Re} f(z) = \frac{\partial \varphi}{\partial u} = 0, \quad u \in]a_1, b_1[\cup]a_2, b_2[, \quad (12)$$

$$f_2(u) = \operatorname{Im} f(z) = -\frac{\partial \varphi}{\partial v} = 0, \quad u \in]-\infty, a_1[\cup]b_1, a_2[\cup]b_2, +\infty[, \quad (13)$$

где $f(z)$ — аналогичная функция, удовлетворяющая на действительной оси условиям (12), (13) и подлежащая определению.

Используя теорему Келдыша–Седова, находим

$$f(z) = \frac{1}{\pi i g(z)} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{g_0(t)g(t)}{t-z} dt + h_0(z), \quad (14)$$

$$g(z) = [(z - b_1)(z - b_2)/(z - a_1)(z - a_2)]^{1/2}, \quad (15)$$

$$g_0(t) = \begin{cases} f_1(t), & t \in]a_1, b_1[\cup]a_2, b_2[, \\ i f_2(t), & t \in]-\infty, a_1[\cup]b_1, a_2[\cup]b_2, +\infty[, \end{cases} \quad (16)$$

$$h_0(z) = \frac{A_0 + A_1 z + A_2 z^2}{\sqrt{(z - a_1)(z - b_1)(z - a_2)(z - b_2)}}, \quad (17)$$

A_0, A_1, A_2 — произвольные действительные постоянные. Из формулы (11) следует

$$\varphi(z) = \operatorname{Re} \int_0^z f(z) dz + A, \quad (18)$$

где A — действительная постоянная.

Подставляя (12)–(17) в формулу (18), получим

$$\varphi(z) = \operatorname{Re} \int_0^z \frac{A_0 + A_1 z + A_2 z^2}{\sqrt{(z - a_1)(z - b_1)(z - a_2)(z - b_2)}} dz + A. \quad (19)$$

Из условия ограниченности $\varphi(z)$ в верхней полуплоскости (включая бесконечно удаленную точку) следует, что $A_1 = A_2 = 0$. В противном случае, при $z \rightarrow \infty$ подынтегральная функция в выражении (19) ведет

себя как z^{-p} ($p \leq 1$), интеграл от которой расходится при $z \rightarrow \infty$. Таким образом,

$$\varphi(z) = \operatorname{Re} \int_0^z \frac{A_0}{\sqrt{(z-a_1)(z-b_1)(z-a_2)(z-b_2)}} dz + A. \quad (20)$$

Остановимся теперь на выборе точек действительной оси a_1, b_1, a_2, b_2 . Функция, реализующая конформное отображение верхней полуплоскости на параллелограмм, описывается интегралом Кристоффеля-Шварца [2]

$$\omega = \xi + i\eta = C_1 \int_0^z (z-a_1)^{-\alpha} (z-b_1)^{\alpha-1} (z-a_2)^{-\alpha} (z-b_2)^{\alpha-1} dz + C_2,$$

$$\alpha = \frac{1}{\pi} \operatorname{arctg} \left(-\frac{\gamma}{\sigma_{xy}} \right), \quad 0 < \alpha < 1, \quad (21)$$

причем согласно теореме Римана три точки из четырех a_1, b_1, a_2, b_2 можно выбрать произвольно. Для упрощения интеграла Кристоффеля-Шварца (20) обычно выбирают [3] $a_1 = -\lambda$ ($\lambda > 0$), $b_1 = 0$, $a_2 = 1$, $b_2 = \infty$. Тогда из (21) получим

$$\omega = \xi + i\eta = C_1 \int_0^z z^{\alpha-1} (z+\lambda)^{-\alpha} (1-z)^{-\alpha} dz. \quad (22)$$

Константа $C_2 = 0$, так что точка $b_1 = 0$ отображается на точку $\omega = 0$ (одна из вершин параллелограмма лежит в начале координат комплексной плоскости $\omega = \xi + i\eta$). Для нахождения неизвестного параметра λ необходимо решить уравнение [1,3]

$$\frac{a}{b} \sqrt{\frac{\sigma_{xx}}{\sigma_{yy}}} = \frac{\int_0^1 z^{\alpha-1} (z+\lambda)^{-\alpha} (1-z)^{-\alpha} dz}{\int_0^1 z^{\alpha-1} (1+\lambda z)^{-\alpha} (1-z)^{-\alpha} dz}, \quad (23)$$

где a и $b\sqrt{\sigma_{yy}/\sigma_{xx}}$ — длины сторон параллелограмма, который получается при аффинном преобразовании (4) прямоугольника со сторонами a, b . Далее, при известном параметре λ находим константу C_1

$$C_1 = \frac{a}{\int_0^1 z^{\alpha-1} (\lambda+z)^{-\alpha} (1-z)^{-\alpha} dz}. \quad (24)$$

Таким образом, с учетом конкретного выбора точек a_1, b_1, a_2, b_2 формула (20) преобразуется к виду

$$\varphi(z) = A_0 \operatorname{Re} \int_0^z (z+\lambda)^{-1/2} z^{-1/2} (1-z)^{-1/2} dz + A. \quad (25)$$

Для нахождения неизвестных констант A_0 и A используем условие (10), тогда

$$A = V_1, \quad (26)$$

$$A_0 = \frac{V_2 - V_1}{\int_0^1 (z + \lambda)^{-1/2} z^{-1/2} (1 - z)^{-1/2} dz}, \quad (27)$$

причем интеграл в знаменателе (27) имеет чисто действительное значение.

В итоге получаем решение краевой задачи (5)–(7) в параметрической форме, в виде двух интегралов типа Кристоффеля–Шварца, где в качестве параметра выступает переменная верхней полуплоскости

$$\varphi(Z) = A_0 \operatorname{Re} \int_0^z (z + \lambda)^{-1/2} z^{-1/2} (1 - z)^{-1/2} dz + A, \quad (28)$$

$$\omega = \xi + i\eta = C_1 \int_0^z (z + \lambda)^{-\alpha} z^{\alpha-1} (1 - z)^{-\alpha} dz. \quad (29)$$

Формула (28) дает распределение потенциала в верхней полуплоскости вне зависимости от ориентации и анизотропии исходного прямоугольного образца. Преобразование (29) отображает эту же полуплоскость на параллелограмм, который является деформированным с помощью (4) прямоугольником, причем степень деформации определяется анизотропией и ориентацией исходного образца относительно главных осей тензора электропроводности.

Соотношения (28) и (29) с учетом (4) являются решением исходной краевой задачи (1)–(3) по распределению потенциала в анизотропной пластине.

Результаты численного расчета распределения потенциала по формулам (28), (29) для плоского прямоугольного образца дифосфида цинка, вырезанного в плоскости максимальной анизотропии (кристаллическая плоскость X_2X_3) под углом 45° к оси X_3 , приведены на рис. 2. Исходные данные для расчета (тензор удельного сопротивления, размеры образца, потенциалы контактов) были взяты из работы [4]. Из рис. 2, на котором результаты расчета показаны сплошными линиями, а экспериментальные данные — точками, видно хорошее согласие

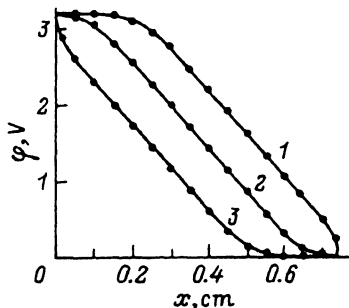


Рис. 2. Распределение потенциала в плоском прямоугольном образце дифосфида цинка. Сплошные линии — расчет по формулам (28), (29) при $y = 0$ (1), $y = b/2$ (2), $y = b$ (3); точки — экспериментальные данные работы [4].

расчета и эксперимента. Например, рассчитанная величина квазихолловской эдс равна 1.64 В, экспериментально измеренная — 1.65 В.

В заключение отметим, что предложенный метод позволяет находить распределение потенциала в плоских анизотропных образцах с произвольно расположенными по периметру пластины двумя точечными контактами. В этом случае распределение потенциала описывается формулой, аналогичной (28)

$$\varphi(Z) = A_0 \operatorname{Re} \int_0^z (z - \lambda_1)^{-1/2} (z - \lambda_2)^{-1/2} (z - \lambda_3)^{-1/2} (z - \lambda_4)^{-1/2} dz + A, \quad (30)$$

где $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4$ — точки действительной оси, которые соответствуют краевым точкам омических контактов.

Список литературы

- [1] М.А. Лаврентьев, Б.В. Шабат. *Методы теории функций комплексного переменного* (М., Физматгиз, 1958).
- [2] Ф.М. Морс, Г. Фешбах. *Методы математической физики* (М., ИЛ, 1958) т. 1.
- [3] В.И. Лаврик, В.Н. Савенко. *Справочник по конформным отображениям* (Киев, Наук. думка, 1970).
- [4] Л.А. Битюцкая, Е.Н. Бормонтов, А.Р. Регель, В.Ф. Сыноров. *ФТП*, 15, 2043 (1981).

Редактор Т.А. Полянская

Modelling the potential distribution in flat samples of anisotropic semiconductors

M. Yu. Khukhryanski

Voronezh State University, 394693 Voronezh, Russia

A conformal mapping method is used to solve the two-dimensional boundary value problem on the potential distribution in a flat rectangular anisotropic sample that is oriented at an angle to main axes of the conductivity tensor. The solution is obtained in a parametric representation — in the form of two Christoffel-Schwartz integrals. There is good agreement between numerical calculations and experimental data.