

Sufficient conditions for stability and instability after the first approaching of solutions of stochastic differential equations with winerian and poisson perturbations in Hilbert spaces are obtained.

Key words: *Hilbert space, stability after the first approaching, formative operator, Markov process.*

Отримано: 06.11.2013

УДК 518:517.948

Р. М. Пелешак, д-р фіз.-мат. наук, професор,

М. В. Дорошенко, канд. фіз.-мат. наук

Дрогобицький державний педагогічний університет
імені Івана Франка, м. Дрогобич

ТОПОЛОГІЯ ЧИСЕЛЬНОГО РОЗВ'ЯЗКУ ДВОВИМІРНОГО РІВНЯННЯ ПУАССОНА З НЕОДНОРІДНІСТЮ У ВИГЛЯДІ РЯДУ З УЗАГАЛЬНЕНИХ ФУНКЦІЙ

Побудовано математичну модель топології розподілу 2D-електростатичного поля в діоді Шотткі з вбудованим шаром квантових точок, яка представляється у вигляді крайової задачі для двовимірного рівняння Пуассона з неоднорідністю у вигляді ряду з узагальнених функцій. Побудований чисельний алгоритм розв'язування крайової задачі методом послідовних надрелаксій.

Ключові слова: *математична модель, електростатичне поле, крайові задачі, рівняння Пуассона, узагальнені функції.*

Постановка проблеми. Інтенсивний розвиток нанотехнологій в останні роки привів до необхідності побудови математичних моделей, які б описували фізико-механічні та електричні властивості наноб'єктів (2D, 1D, 0D — наногетеросистем). Сучасні нанотехнології дозволяють вирощувати, як окремі квантові точки (КТ), так і цілі масиви когерентно-напружених КТ, на основі яких створюються нанооптоелектронні прилади (лазери, світло-діоди, діоди Шотткі) [1–6]. Побудова приладів з використанням масивів КТ (InAs/GaAs, CdTe/ZnTe) дозволяє ефективно керувати їхніми електричними та оптичними характеристиками, завдяки прогнозованому контролю технологічних параметрів таких як щільність, відстані від масиву КТ до контакту метал — напівпровідник, розміри, форма, спектр станів носіїв заряду. Зокрема, за наявності вбудованих в область просторового заряду КТ бар'єрної структури виду Шотткі за певних технологічних параметрів можливе виникнення S-подібних вольт-амперних характеристик діодів Шотткі, які можуть бути використані в високо-частотній електроніці.

У цій статті топологія розв'язку двовимірного рівняння Пуассона буде застосована для опису розподілу електростатичного поля в наногетеросистемі з квантовими точками, зокрема, в діоді Шотткі з вбудованим шаром квантових точок. Результати роботи можуть бути використані при побудові наноелектронних приладів на основі масивів КТ (InAs/GaAs, CdTe/ZnTe(ZnNe)) для прогнозованого керування їхніми електричними та оптичними характеристиками.

Аналіз попередніх публікацій. Для розв'язку такого виду задач широке застосування отримали скінченно-різницеві [7; 8, с. 247–256; 9, с. 579–588], варіаційні методи [10, с. 113–126], метод інтегральних рівнянь [11] та функціонально-дискретні (FD) методи [12]. У роботах [1; 2] було досліджено для одновимірного випадку, без врахування деформаційних ефектів, розподіл електростатичного потенціалу $\varphi(x)$ в області просторового заряду в околі межі контакту метал — напівпровідник GaAs з шаром квантових точок InAs [2], вольт-фарадні характеристики [2] та розподіл потенціалу і процеси транспорту в кремнієвих діодах Шотткі, які містять масив нанокластерів германію [1].

Мета роботи: побудова математичної моделі та чисельне знаходження, на основі методу послідовних надрелаксацій [9, с. 585–586], топології розподілу двовимірного електростатичного потенціалу $\varphi(x, y)$ з урахуванням деформаційних полів, що виникають на межі КТ — матриця (~7% — InAs/GaAs; ~4% CdTe/ZnTe) в площині шару квантових точок, які вбудовані в область просторового заряду бар'єрної структури метал — легований n -напівпровідник.

Виклад основних результатів. Геометрична модель структури метал — легований донорною домішкою напівпровідник GaAs(ZnTe) з вбудованим шаром КТ (InAs, CdTe), який розміщений на відстані $x=L_d$ від поверхні металу, представлена на рис. 1. У шарі (напрямок OY , рис. 1) квантові точки розміщені періодично на відстані h одна від одної. Початок координати x відраховується від межі контакту метал–напівпровідник у напрямку напівпровідника.

Однією з основних характеристик діода Шотткі є висота потенціального бар'єру φ_{BS} на межі метал — напівпровідник. Висоту потенціального бар'єру можна змінювати способом введення в напівпровідникову матрицю (n — GaAs) шару КТ InAs. Висоту потенціального бар'єру можна змінювати способом введення напівпровідникову матрицю (n — GaAs) шару КТ InAs. Границю збідненого шару ($V = 0$) можна оцінювати із співвідношення [1]

$$W(V = 0) \approx \sqrt{(2\varepsilon\varepsilon_0 / eN_d)}(\varphi_{BS} - kT / e)$$

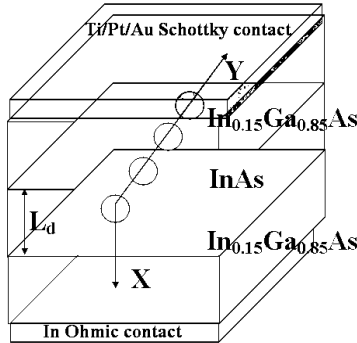


Рис. 1. Геометричне представлення діоду Шотткі структури мета — напівпровідник з вбудованим шаром квантових точок

Топологія розподілу потенціалу $\varphi(x, y)$ в бар'єрній структурі метал — n -напівпровідник, який містить шар квантових точок і геометрична модель, якої представлена на рис. 1, пропонується описувати на основі розв'язку такого двовимірного рівняння Пуассона:

$$\frac{\partial^2 \varphi_i}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi_i}{\partial y^2} = -\frac{eN_d}{\varepsilon_d^{(i)} \varepsilon_0} + \frac{eN_{QD}}{\varepsilon_d^{(i)} \varepsilon_0 L_d} \delta\left(\frac{x}{L_d} - 1\right) \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta\left(\frac{y}{h} - 1\right), \quad (1)$$

де, $i = \begin{cases} 1 \equiv \text{InAs}, \\ 2 \equiv \text{GaAs} \end{cases}$, $\varepsilon_d^{(i)}$ — відносна діелектрична проникність i -того

матеріалу наногетеросистеми; ε_0 — діелектрична стала; e — заряд електрона; N_{QD} — поверхнева густина квантових точок; N_d — концентрація донорів; L_d — відстань від металу до шару КТ; h — відстань між квантовими точками в напрямку OY .

Рівняння Пуассона (1) має неоднорідність у вигляді ряду з узгальнених функцій. Крайові умови для двовимірного рівняння Пуассона (1) представляються у вигляді крайових умов першого роду, а саме, умов Діріхле такого вигляду:

$$\begin{aligned} \varphi(0, x) &= \varphi_{BS}, \\ \varphi(L_x, y) &= 0, \\ \varphi(x, 0) &= \varphi_{BS} - \frac{1}{2} \frac{eN_d}{2\varepsilon\varepsilon_0} x^2, \\ \varphi(x, L_y) &= \varphi_{BS} - \frac{1}{2} \frac{eN_d}{2\varepsilon\varepsilon_0} x^2, \end{aligned} \quad (2)$$

де φ_{BS} — висота потенціального бар'єру на межі метал-напівпровідник.

У правій частині рівняння (1) перший доданок описує густину заряду іонізованої домішки, другий доданок — густину заряду, зумо-

влену захопленням електронів у стани квантових точок, які виникають за рахунок просторового квантування та виникненню дискретного спектру у квантовій точці. Ці стани локалізовані в просторі, тому густину заряду в квантових точках можна змодельовати у вигляді ряду з узагальнених функцій.

За правилом сумування за Пуассоном ряд з узагальнених функцій $\sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(y - nh)$ можна звести до вигляду

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(y - nh) = \frac{1}{|h|} \sum_{k=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \delta\left(\frac{y}{h} - z\right) e^{2\pi i k z} dz = \frac{1}{|h|} \left(1 + 2 \sum_{k=1}^{\infty} \cos 2\pi k \frac{y}{h}\right). \quad (3)$$

Підставивши співвідношення (3) у рівняння (1) та здійснивши перехід до безрозмірних величин отримуємо двовимірне рівняння Пуассона

$$\frac{\partial^2 \tilde{\varphi}_i}{\partial \tilde{x}^2} + \frac{\partial^2 \tilde{\varphi}_i}{\partial \tilde{y}^2} = -1 + \frac{N_{QD}}{N_d L_d} \delta(\tilde{x} - 1) \left(1 + 2 \sum_{k=1}^{\infty} \cos 2\pi k \frac{\tilde{y} L_d}{h}\right) \quad (4)$$

з такими крайовими умовами:

$$\begin{aligned} \tilde{\varphi}(0, x) &= \tilde{\varphi}_{BS}, \\ \tilde{\varphi}(\tilde{L}_x, y) &= 0, \\ \tilde{\varphi}(x, 0) &= \tilde{\varphi}_{BS} - \frac{1}{2} \tilde{x}^2, \\ \tilde{\varphi}(x, \tilde{L}_y) &= \tilde{\varphi}_{BS} - \frac{1}{2} \tilde{x}^2, \end{aligned} \quad (5)$$

де $\tilde{x} = \frac{x}{L_d}$, $\tilde{y} = \frac{y}{L_d}$, $\tilde{L}_x = \frac{L_x}{L_d}$, $\tilde{L}_y = \frac{L_y}{L_d}$, $\tilde{\varphi} = \frac{\varphi}{\varphi_0}$, $\varphi_0 = \frac{\varepsilon \varepsilon_0}{e N_d} (L_d)^2$.

Розв'язування крайової задачі (4)–(5) здійснюється на основі методу послідовних надрелаксацій [9, с. 585–586]. Для апроксимації двовимірного рівняння Пуассона використовувалась п'ятиточкова різницева схема у вузлах сітки, на яку розбивається прямокутна область ($0 \leq \tilde{x} \leq \tilde{L}_x$, $0 \leq \tilde{y} \leq \tilde{L}_y$).

Для знаходження розподілу потенціалу у внутрішніх вузлах сітки використовувалась така ітераційна різницева схема:

$$\varphi_{i,j}^{k+1} = \varphi_{i,j}^k + p \left(\frac{\varphi_{i+1,j}^k + \varphi_{i-1,j}^k + \varphi_{i,j+1}^k + \varphi_{i,j-1}^k - 4\varphi_{i,j}^k - h^2 g_{i,j}}{4} \right) = \varphi_{i,j}^k + p r_{i,j}^k \quad (6)$$

де $i = 1, 2, \dots, n-1$; $j = 1, 2, \dots, m-1$, $k = 0, 1, \dots$; R_0 — радіус КТ;

$$g_{i,j} = -1 + \frac{N_{QD}}{N_d} \frac{1}{\sqrt{\pi} R_0} e^{-(L_d/R_0)^2 (\tilde{x}_i - 1)^2} \left(1 + 2 \sum_{k=1}^{\infty} \cos\left(2\pi k \frac{\tilde{y}_j L_d}{h}\right)\right),$$

а крайові умови представлялись таким чином:

$$\begin{aligned}
\varphi_{0,j} &= \tilde{\varphi}_{BS}, \\
\varphi_{n,j} &= 0, \\
\varphi_{i,0} &= \tilde{\varphi}_{BS} - \frac{1}{2} \tilde{x}_i^2, \\
\varphi_{i,m} &= \tilde{\varphi}_{BS} - \frac{1}{2} \tilde{x}_i^2, \\
i &= 1, \dots, n; j = 1, \dots, m.
\end{aligned} \tag{7}$$

У методі послідовних надрелаксацій коефіцієнт p може приймати значення $1 \leq p < 2$. Оптимальне значення параметра p обчислюється за допомогою формули [9, с. 586]

$$p = \frac{4}{2 + \sqrt{4 - \left(\cos\left(\frac{\pi}{n-1}\right) + \cos\left(\frac{\pi}{m-1}\right) \right)^2}}. \tag{8}$$

Умовою зупинки ітераційної розрахункової схеми (6)–(7) є виконання такої нерівності:

$$\|r\| < \varepsilon, \text{ де } \|r\| = \max_{i,j} |r_{i,j}^k|, \varepsilon > 0. \tag{9}$$

Алгоритм (6)–(9) розв'язування рівняння Пуассона (4) з крайовими умовами Діріхле (5) був реалізований в системі комп'ютерної математики (СКМ) Matlab. Числові розрахунки здійснювались при таких значеннях параметрів: $\varphi_{BS} = 0.6 \text{ В}$, $L_d = 40 \text{ \AA}$; $h = 100 \text{ \AA}$; $R_0 = 30 \text{ \AA}$; $N_d = 10^{18} \text{ см}^{-3}$

На рис.2 приведені числові розрахунки розподілу електростатичного потенціалу $\varphi(x, y)$ в площині XY шару квантових точок (InAs) вбудованих у область просторового заряду в напівпровіднику n -типу (GaAs) на відстанях $0 \leq x \leq W$ від межі контакту метал-легований n -типу напівпровідник. Квантові точки розміром R_0 технологічно вбудовані в шар напівпровідника на відстані $x = L_d$ від металу. Як видно (рис. 2) потенціал $\varphi(y)$ (рис. 4, $x = \{50 \text{ \AA}, 100 \text{ \AA}, 150 \text{ \AA}, 200 \text{ \AA}, 250 \text{ \AA}\}$) вздовж напрямку розміщення КТ в напрямку OY має осциляційний характер з періодом h , причому, період осциляції визначається кроком розміщення КТ, а в напрямку OX , перпендикулярному до межі контакту метал-легований n -типу напівпровідник, потенціал $\varphi(x)$ (рис. 5, $y = \{50 \text{ \AA}, 100 \text{ \AA}, 150 \text{ \AA}, 200 \text{ \AA}, 250 \text{ \AA}\}$) має немонотонний характер.

Результати дослідження розподілу електронної густини в околі межі поділу КТ (InAs) — напівпровідникова матриця (GaAs) показали [6], що розподіл поверхневої густини заряду $\sigma(y)$, вздовж періодично розміщених квантових точок, можна представити у вигляді

періодичної кусково-сталої функції. У межах цього наближення потенціал $\varphi(x)$ в напрямку перпендикулярному до межі контакту метал-легований n -типу напівпровідник (OX) описується експоненційною залежністю $\exp(-\alpha|x|)$ [13].

На рис. 3 приведені числові розрахунки екіпотенціальних ліній в околі квантових точок при значеннях параметрів $\varphi_{BS} = 0.6$ В, $L_d = 40 \text{ \AA}$; $h = 100 \text{ \AA}$; $R_0 = 30 \text{ \AA}$; $N_d = 10^{18} \text{ см}^{-3}$, які реалізуються у експерименті [1, 14]. Аналіз розрахунків екіпотенціальних ліній в бар'єрній структурі Шотткі з вбудованим шаром КТ показує (рис. 3), що крім електричного поля \vec{E}_{BS} , створеного на межі контакту метал- n -напівпровідник існує ще електричне поле \vec{E}_{QD} утворене на межі розділу КТ — напівпровідникова матриця [6]. Результируюче електричне поле в бар'єрній структурі Шотткі з вбудованим шаром КТ визначається суперпозицією цих двох полів $\vec{E}_R = \vec{E}_{BS} + \vec{E}_{QD}$. Топологія розподілу екіпотенціальних ліній (рис. 3) показує, що x -складова напруженості результируючого електричного поля в області просторового заряду між металом і шаром КТ визначається різницею складових електричних полів, створених на межі контакту метал-напівпровідник та на межі контакту КТ — матриця $E_R^x = E_{BS}^x + E_{QD}^x$. У напрямку паралельному до межі розділу метал — n -напівпровідник y -складова напруженості результируючого електричного поля E_R^y має періодичний характер і в площинах $y_n = (2n+1)\frac{h}{2}$ ($n = 0, 1, 2, \dots$) — $E_R^y = 0$. Зокрема, при значеннях параметрів $\varphi_{BS} = 0.6$ В, $L_d = 40 \text{ \AA}$; $h = 100 \text{ \AA}$; $R_0 = 30 \text{ \AA}$; $N_d = 10^{18} \text{ см}^{-3}$ x -компонента результируючого електричного поля E_R^x поблизу межі метал — n -напівпровідник становить $5.5 \cdot 10^5$ В/см, а поблизу площини КТ — $4 \cdot 10^5$ В/см.

З приведених досліджень розподілу електростатичного потенціалу в бар'єрній структурі Шотткі з вбудованим шаром квантових точок випливає, що наявність періодично розміщених квантових точок в області просторового заряду приводить до виникнення в напівпровіднику, паралельно межі контакту метал-напівпровідник, періодичних $n - n+1$ або $p - p - n$ переходів. Крім цього, як показують результати експериментальних досліджень вольт-амперні характеристики діодів Шотткі з вбудованим шаром квантових точок мають S-подібний характер [15] при умові, що шар квантових точок знаходиться на відстанях від межі контакту метал-напівпровідник порядку $(10-30)a_0$, де a_0 — період ґратки напівпровідника.

Завдяки наявності квантових точок в бар'єрній структурі Шотткі можна підвищити коефіцієнт корисної дії (ККД) елементів сонячних

батареї побудованих на основі поверхневих бар'єрних структур з вбудованим шаром КТ [16].

Також були проведені чисельні дослідження швидкості збіжності ітераційної розрахункової схеми (6)–(9) при різних значеннях параметра p (кількість ітерацій при різних значеннях p , при якому точність чисельного розв'язку не перевищує 0,0001, приведені в таблиці 1).

Таблиця 1

$p = 1$	$p = 1,5$	p — визначається за формулою (8)
1335	1158	1051

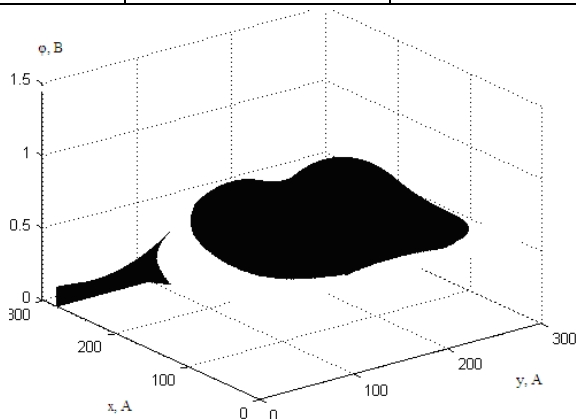


Рис. 2. Топологія розподілу електростатичного потенціалу в бар'єрній структурі Шотткі з вбудованим шаром квантових точок у область просторового заряду

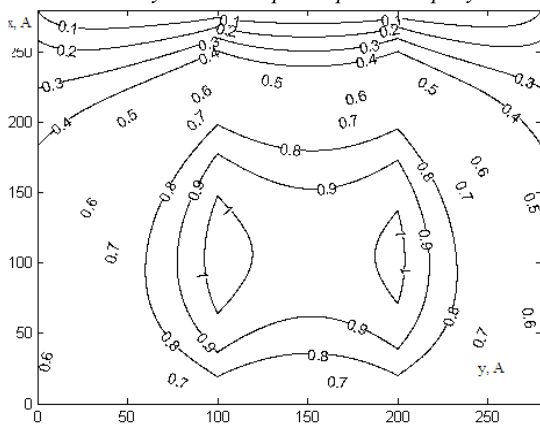


Рис. 3. Топологія розподілу еквіпотенціальних ліній в околі квантових точок

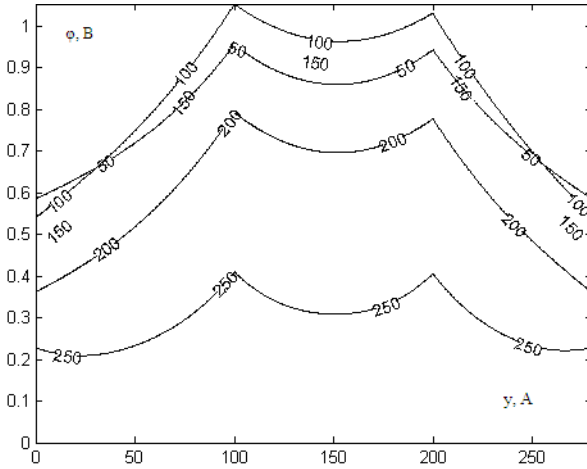


Рис. 4. Координатна залежність розподілу електростатичного потенціалу вздовж напрямку розміщення КТ в напрямку OY

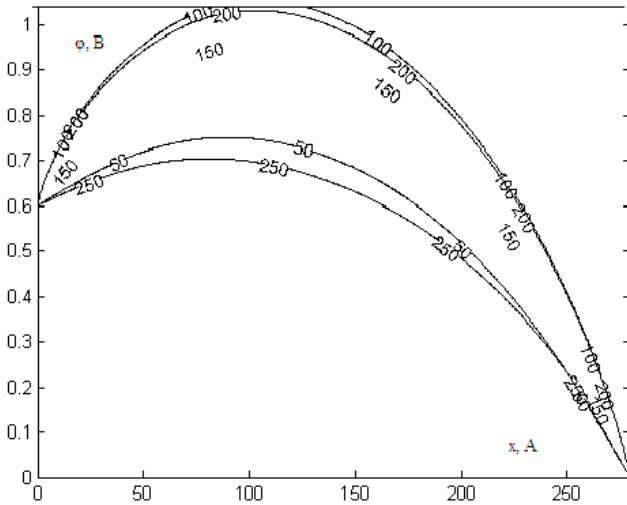


Рис.5. Координатна залежність розподілу електростатичного потенціалу вздовж напрямку розміщення КТ в напрямку перпендикулярному до межі контакту метал-легований n -типу напівпровідник в напрямку OX

Висновки. Побудована математична модель топології розподілу 2D-електростатичного поля в діоді Шотткі з вбудованим шаром квантових точок, яка представляється у вигляді крайової задачі для двовимірного рівняння Пуассона з неоднорідністю у вигляді ряду з узагальнених функцій.

1. Побудований алгоритм чисельного розв'язування крайової задачі для ряду з двовимірною рівняння Пуассона з неоднорідністю у вигляді ряду з узагальнених функцій.
2. Встановлено, що вздовж напрямку розміщення квантових точок (ОУ) потенціал має осцилюючий характер з періодом h , який визначається характером розміщення квантових точок, а в напрямку перпендикулярному до межі контакту метал-легований n -типу напівпровідник описується експоненційною залежністю $\exp(-\alpha|x|)$.

Список використаних джерел:

1. Высота барьера в тушельный ток в диодах Шоттки со встроенными слоями точек / А. И. Якимов, А. В. Двуреченский, А. И. Никифоров, С. В. Чайковский // Письма в ЖЭТФ. — 2002. — Вып. 75, № 2. — С. 113–117.
2. Lin S. D. Observation of the negative differential capacitance in Schottky diodes with dots near room temperature / S. D. Lin, V. V. Ilchenko, V. V. Marin // Appl. Phys. Lett. — 2007. — Р. 90.
3. Двуреченский А. В. Гетероструктуры Ge/Si с квантовыми точками / А. В. Двуреченский, А. И. Якимов // УФН. — 2001. — Вып. 171. — С. 7.
4. ФТП / Н. Н. Леденцов, В. М. Устинов, В. А. Щукин и др. — 1998. — Т. 32, № 4. — С. 385–410.
5. Стасюк І. В. Деформаційні і електронні стани напівпровідника поблизу поділу областей з різними механічними напруженнями / І. В. Стасюк, Р. М. Пелешак // УФЖ. — 1994. — Вип. 39. — С. 856.
6. Peleshchak R. M. Electric properties of the interface quantum dot-matrix / R. M. Peleshchak, I. Ya. Bachynsky // Condensed Matter Physics. — 2009. — Vol. 12, №2. — Р. 215–223.
7. Бейбалаев В. Д. О численном решении задачи Дирихле для уравнения Пуассона с производными дробного порядка / В. Д. Бейбалаев // Вестн. Сам. гос. техн. ун-та. Сер. Физ.-мат. науки. — 2012. — С. 81–87.
8. Кутнів М. В. Чисельні методи / М. В. Кутнів. — Львів : Вид.-во Растр-7, 2010. — 288 с.
9. Мэтьюз Д. Г. Численные методы. Использование Matlab / Д. Г. Мэтьюз, К. Д. Финк. — М. ; СПб : Вильямс, 2001. — 713 с.
10. Марчук Г. И. Методы вычислительной математики / Г. И. Марчук. — М. : Наука, 1980. — 534 с.
11. Остудін Б. А. Розв'язність задачі Діріхле для рівняння Пуассона в просторі зі щілинами та еквівалентне інтегральне рівняння / Б. А. Остудін, Ю. М. Сибіль, А. В. Романенко // Вісник Львів. ун-та. Сер. Прикладна математика та інформатика. — 2003. — № 6. — С. 90–97.
12. Макаров В. Л. О функционально-разностном методе произвольного порядка точности решения задачи Штурма-Лиувилля с кусочно-гладкими коэффициентами / В. Л. Макаров // ДАН СССР. — 1991. — Т. 320, № 320. — С. 34–39.
13. Шашкин В.И. Управление характером токопереноса в барьере Шоттки с помощью легирования: расчет и эксперимент для Al/GaAs / В. И. Шашкин, А. В. Мурель, В. М. Данильцев // ФТП. — 2002. — Т. 36, № 5. — С. 537–542.

14. Антонов Л. И. Методика решения задач по электричеству / Л. И. Антонов, Л. Г. Деденко, А. Н. Матвеев. — М. : Изд.-во МГУ, 1982. — 168 с.
15. Bisability of Resonant Tunnel Diode structure with InAs Quantum Dots / K. Yoh, H. Kazama, Y. Kitashou, T. Nekano // Phys.Stat.Sol.(b). — 1997. — Vol. 204, № 3. — P. 378–381.
16. Li H. W. Hysteresis in electronic transport through an ensemble of InAs self-assembled quantum dots / H. W. Li, T. H. Wang // Physica B. — 2001. — Vol. 301, № 1. — P. 174–179.

The mathematical model topology distribution 2D-electrostatic field in the Schottky diode with built-in layer of quantum dots, which is represented as a boundary value problem for two dimensional Poisson equation with the heterogeneity in the form of series of generalized functions. The numerical algorithm for solving boundary value problems by the method of successive overrelaxation.

Key words: *mathematical model, electrostatic field, boundary value problem, Poisson equation, generalized functions.*

Отримано: 22.11.2013

УДК 517.927

В. Б. Поселожна, канд. фіз.-мат. наук

Чортківський навчально-науковий інститут підприємництва і бізнесу Тернопільського національного економічного університету, м. Чортків

НЕСТАЦІОНАРНИЙ КОЛОКАЦІЙНО-ІТЕРАТИВНИЙ МЕТОД РОЗВ'ЯЗУВАННЯ КРАЙОВОЇ ЗАДАЧІ ДЛЯ ЗВИЧАЙНИХ ДИФЕРЕНЦІАЛЬНИХ РІВНЯНЬ З ПАРАМЕТРАМИ

Розглядається питання застосування нестационарного колокаційно-ітеративного методу до розв'язування крайових задач для звичайних диференціальних рівнянь з параметрами. Побудовано алгоритм методу, встановлено достатні умови його збіжності.

Ключові слова: *крайова задача, диференціальні рівняння, інтегральне рівняння, нестационарний колокаційно-ітеративний метод.*

Вступ. При математичному моделюванні фізичних, хімічних, біологічних та економічних процесів виникають різноманітні задачі для диференціальних, інтегральних, інтегро-диференціальних рівнянь та їх систем.

У більшості практичних ситуацій отримання точного аналітичного розв'язку таких задач є досить складним процесом і потребує