

Stichting
MATHEMATISCH CENTRUM
2e Boerhaavestraat 49
Amsterdam

TW 2

Photospanningen in kristallen

J.H.B. Kemperman

11 februari 1949

Verantwoording.

Voor de samenstelling van dit rapport is verantwoordelijk de Heer J. Kemperman. De verkregen resultaten zijn de vrucht van een geregeld overleg tussen B.L. van der Waerden, A. van Wijngaarden en J. Kemperman. In het bijzonder zijn de centraal staande beschouwingen van blz. 3 t/m blz. 11 afkomstig van Dr. Ir. A. van Wijngaarden.

Résumé.

Gevraagd wordt het verloop van de electronenconcentratie in een half-oneindig kristal, waarvan één zijwand stationnair wordt belicht. Wiskundig is het probleem equivalent met een randwaardeprobleem bij een niet-lineaire gewone differentiaalvergelijking. Deze vergelijking wordt door transformatie der veranderlijken op een meer hanteerbare gedaante gebracht, waarna bewezen wordt, dat mathematisch het gestelde probleem eenduidig oplosbaar is. Tevens wordt het te verwachten verloop geschetst van de gezochte oplossing.

Numeriek zou het probleem kunnen worden opgelost door aan het belichte uiteinde van het kristal de beginhoogte van de aldaar horizontaal beginnende oplossing van de differentiaalvergelijking door proberen (approximatie) zo te kiezen, dat de numeriek voortgezette oplossing monotoon naar nul convergeert (alle andere oplossingen divergeren). Om het vereiste rekenwerk tot een fractie te reduceren wordt een asymptotische ontwikkeling opgesteld van de oneindig vele oplossingen van de differentiaalvergelijking, die in het oneindige niet divergeren. Deze ontwikkeling wordt uitvoerig besproken. Afgeleid wordt verder het asymptotisch gedrag van de oplossing in afhankelijkheid van de lichtsterkte J , doch alleen voor kleine waarden van J . Tenslotte worden nog enige opmerkingen gemaakt over een door de Heer R. van Lieshout gebruikte iteratiemethode.

Het Mathematisch Centrum
— — — Afdeling toegepaste Wiskunde — — —

RAPPORT Nr. 2.

Auteur: J. H. B. Kemperman;

Titel: Photospanningen in kristallen,

Datum: 11 Februari 1949.

Het fysische probleem is terug te brengen tot de volgende differentiaalvergelijkingen

$$(1) \Lambda_1 + \Lambda_2 e^{-\mu x} - \gamma n N = 0$$

$$(2) kT u \frac{dn}{dx} + n \mathcal{E} u F = 0$$

$$(3) \frac{dF}{dx} = 4 \pi \mathcal{E} (N - n)$$

waarin n, N, F functies zijn van de variabele x (aantal electronen per cm^3 , resp. aantal positieve gaten per cm^3 , resp. veldsterkte ter plaatse). De overige grootheden zijn constanten:

Λ_1 = electronenproductie per cm^3 en per seconde tengevolge van de warmtebeweging.

μ = absorptiecoëfficiënt, d.w.z. de lichtintensiteit op een afstand x van het belichte grensvlak is evenredig met $e^{-\mu x}$.

Λ_2 = electronenproductie / $\text{cm}^3 \cdot \text{sec.}$ aan het belichte zijvlak tengevolge van het geabsorbeerde licht. Bij een abcis x dus $\Lambda_2 e^{-\mu x}$.

γ = constante factor in de voor recombinitie van electronen en gaten gebezigde formule

$$dN = -\gamma n N dt$$

k = constante van Boltzmann.

T = temperatuur.

$\mathcal{E}$ = lading van electron.

u = beweeglijkheid van een electron in het kristal.

- (1) drukt uit, dat de electronenproductie (door warmtebeweging en lichtabsorptie) in de stationnaire toestand juist door de recombinitie wordt opgeheven.
- (2) drukt uit, dat de bewegingen der electronen tengevolge van het aanwezige veld resp. tengevolge van de diffussie elkaar juist opheffen, ook weer in stationnaire toestand.
- (3) geeft het verband tussen $F(x)$ en de ladingsverdeling (wet v. Poisson)

In een onbelicht kristal is het aantal electronen n_0 overal gelijk. Zij analoog N_0 het aantal positieve gaten per cm^3 . Daar het kristal ongeladen is, geldt $n_0 = N_0$. De toestand is stationnair doordat de productie tengevolge van de warmtebeweging juist wordt geneutraliseerd door de recombinitie. Dus

$$\text{zodat } \frac{\Lambda_1}{\gamma} = n_0^2 \quad \text{en} \quad \frac{\Lambda_2}{\gamma} = n_0^2 \quad \Lambda_2 = n_0^2 \cdot J \quad \text{als}$$

$$J = \frac{\Lambda_2}{\gamma}$$

en de vergelijking (1) schrijven we nu als

$$(4) \quad 1 + J e^{-\mu x} = \frac{1}{n_0^2} \cdot n N$$

Uit (2), (3) en (4) volgt een differentiaalvergelijking voor $n(x)$. Uit (2) volgt vooreerst

$$F = - \frac{kT}{\epsilon} \cdot \frac{d \log n}{dx}$$

en met (3) vinden we dan

$$(5) \quad \frac{dF}{dx} = - \frac{kT}{\epsilon} \cdot \frac{d^2 \log n}{dx^2} \equiv 4 \pi \epsilon (N - n) .$$

Eliminatie van N uit (4) en (5) geeft tenslotte

$$(6) \quad \frac{n_0^2}{n} (1 + J e^{-\mu x}) = - \frac{kT}{4 \pi \epsilon^2} \cdot \frac{d^2 \log n}{dx^2} + n .$$

Stel $m = \frac{n}{n_0}$. Voor m vinden we de differentiaalvergelijking

$$(7) \quad \frac{kT}{4 \pi \epsilon^2 n_0} \cdot m \frac{d^2 \log m}{dx^2} - m^2 + 1 + J e^{-\mu x} = 0 .$$

Tenslotte geeft de transformatie

$$z = b \left(x - \frac{1}{\mu} \log 1/2 J \right) \quad \text{met } b^2 = \frac{8 \pi \epsilon^2 n_0}{kT}$$

de vergelijking

$$2m \frac{d^2 \log m}{dx^2} - m^2 + 1 + 2e^{-\lambda z} \quad (\text{als } \lambda = \frac{\mu}{b}) .$$

Daar de gezochte oplossing $n(x)$, dus $m(x)$ positief is kunnen we stellen

$$p = \log m = \log \frac{n}{n_0} ,$$

waarin p aan de volgende differentiaalvergelijking voldoet

$$(8) \quad \frac{d^2 p}{dz^2} = \text{Sh}(p) - e^{-\lambda z} e^{-p} .$$

De opgave is nu een begrensde niet-negatieve oplossing $n(x)$ van (6) te bepalen onder de randvoorwaarden

$$1. \quad \frac{dn}{dx} = 0 \text{ voor } x=0 .$$

$$2. \quad \frac{dn}{dx} \rightarrow 0 \text{ voor } x \rightarrow \infty$$

Immers aan beide randen van het kristal kunnen we een grenslaag beschouwen van een dikte Δx (inhoud van de 1^e orde in Δx). Als nu $\frac{dn}{dx} \neq 0$, dan is het aantal wegdiffunderende elektronen $\pm C \cdot \frac{dn}{dx}$ (waarin $C \neq 0$), dus van de nulde orde in Δx , hetgeen onmogelijk is. Aan de beide uiteinden is dus $\frac{dn}{dx} = 0$. Nu zijn de gebruikte plaatjes zo dik, dat er praktisch geen licht doorheen gaat, en dus de rechterrand bij $x = \infty$ mag worden aangenomen.

De opgave voor vergelijking (8) wordt nu een oplossing te bepalen, die voldoet aan de randvoorwaarden

$$(9) \quad \frac{dp}{dz} = 0 \text{ voor } x=0, \text{ dus voor } z=z_0 = - \frac{b}{\mu} \cdot \log 1/2 J$$

en

$$(10) \quad \frac{dp}{dz} \rightarrow 0 \text{ voor } z \rightarrow \infty .$$

Voor elke negatieve waarde van z_0 moeten we dus een functie $p(z)$ bepalen, die aan (8) en (10) voldoet en bovendien aan $\frac{dp}{dz} = 0$ voor $z = z_0$.

Karakter van de gezochte oplossing.

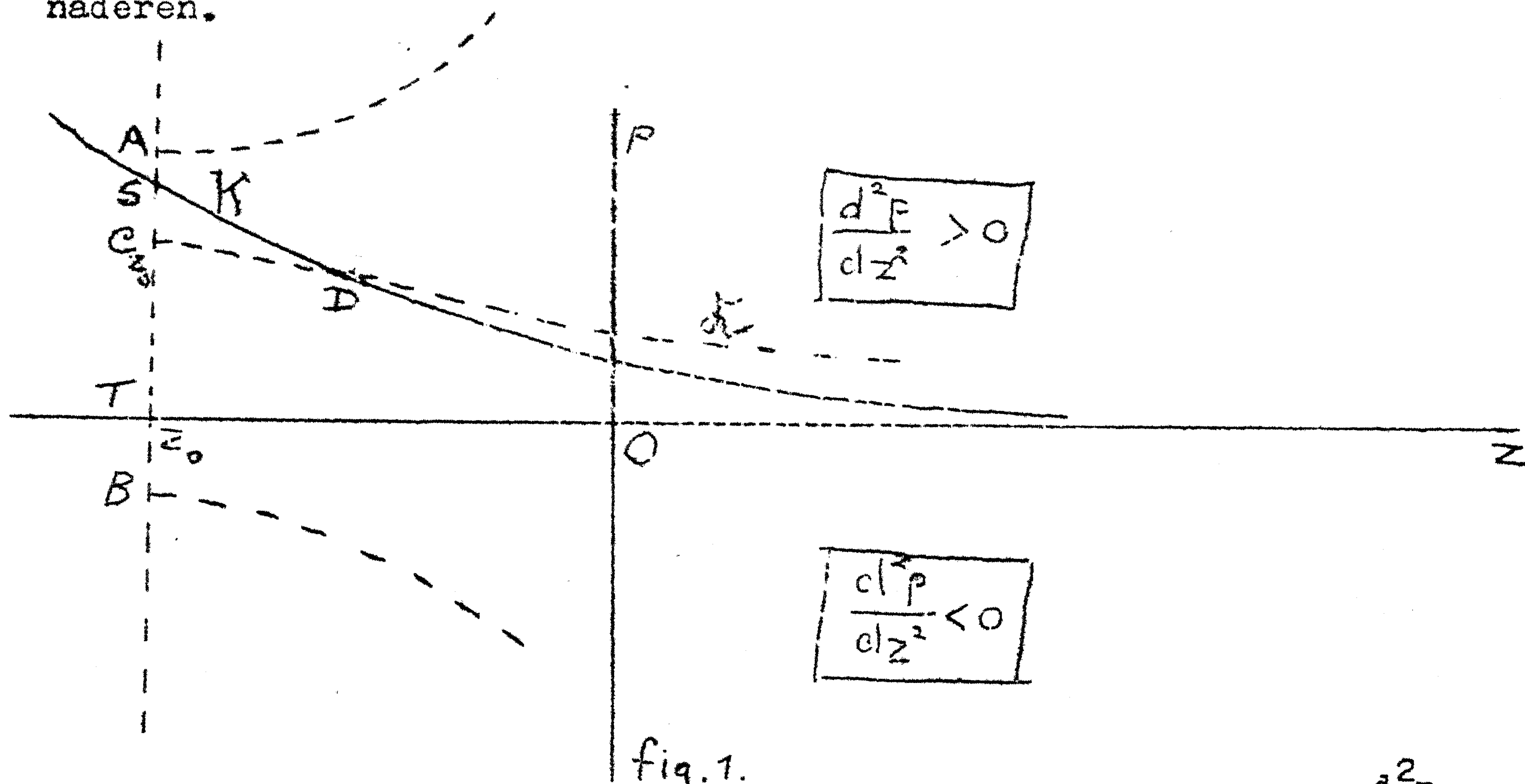
Uit vergelijking (8) volgt, dat de meetkundige plaats van de buigpunten van de oplossingskrommen van (8) in het p - z -vlak een kromme K is met vergelijking

$$(11) \quad \text{Sh } p - e^{-\lambda z} e^{-p} = 0$$

of

$$p = \varphi(z) = 1/2 \log(1 + 2e^{-\lambda z})$$

(waarin dus $\varphi(z) \geq 0$), en voor $z \rightarrow \infty$ blijkt K monotoon tot de z -as te naderen.



Nu scheidt K juist de gebieden waar voor de oplossingskrommen $\frac{d^2 p}{dz^2} > 0$, resp. $\frac{d^2 p}{dz^2} < 0$ (boven resp. beneden K). We zien nu gemakkelijk in, dat oplossingskrommen met een der volgende kenmerken, zullen divergeren naar $+\infty$ of $-\infty$ als $z \rightarrow +\infty$.

1. De kromme heeft in een punt P boven K een horizontale raaklijn.
2. " " " " " " " bened. de z -as " "
3. De kromme heeft in een punt P beneden K met abscis z_1 een (negatieve) helling, kleiner dan de helling van K in het boven P gelegen punt Q van K , dus

(12)

$$p(z_1) \leq \varphi(z_1) \text{ en } \frac{dp(z_1)}{dz} < \frac{d\varphi(z_1)}{dz} < 0.$$

Om aan de randvoorwaarde (10) te kunnen voldoen moet het beginpunt C_{z_0} (abscis z_0), waar de oplossingskromme een horizontale raaklijn heeft, noodzakelijk liggen in het door K en de z -as ingesloten gebied G . Anders zal voor $z \rightarrow +\infty$ de oplossing $p(z)$, en mede $\frac{dp}{dz}$, zeker divergeren. Laten we nu een punt C het binnen G gelegen interval FT op $z = z_0$ doorlopen, dan zal de in C horizontaal beginnende oplossingskromme naar $+\infty$ divergeren, als C samenvalt met S , en evenzeer naar $-\infty$ als $C = T$. Op het interval ST ligt een concludig bepaald punt C_{z_0} ,

zo dat de corresponderende oplossingskromme voor $z \rightarrow +\infty$ begrensd blijft. We kunnen wel ongeveer beschrijven hoe de gezochte oplossingskromme $\mathcal{K}$ verloopt. Even rechts van het beginpunt C_{z_0} (waar $\mathcal{K}$ een horizontale raaklijn heeft) is de helling negatief:

$$\frac{dp(z_0 + \varepsilon)}{dz} = \eta < 0.$$

Zou nu $\mathcal{K}$ steeds beneden K blijven, dan wordt deze helling voor $z \rightarrow \infty$ steeds sterker negatief. Dus voor $z > z_0$

$$p(z_0) - p(z) > \eta (z - z_0) > 0$$

en $\mathcal{K}$ zou divergeren. Dus vanaf C_{z_0} gerekend is er een eerste punt D waar $\mathcal{K}$ en K elkaar snijden. Natuurlijk heeft $\mathcal{K}$ daar een negatieve helling (anders divergentie). Een volgend snijpunt E van $\mathcal{K}$ en K is uitgesloten. In E zou $\mathcal{K}$ n.l. een negatieve afgeleide hebben, die in absolute waarde groter is dan de eveneens negatieve afgeleide van K in E . Wegens (12) treedt in zo'n geval evenwel divergentie op. Dus voorbij D verloopt $\mathcal{K}$ voortdurend boven K , terwijl de helling negatief blijft en $\mathcal{K}$ is dus een monotone dalende kromme, met

$$(13) \quad \lim_{z \rightarrow +\infty} p(z) = \alpha \geq 0$$

Wegens (8) volgt voor $\mathcal{K}$

$$\lim_{z \rightarrow +\infty} \frac{d^2 p}{dz^2} = \text{Sh } \alpha \geq 0.$$

Als nu geldt $\alpha > 0$, dan is ook $\text{Sh } \alpha > 0$; dus bestaat een positief getal M , zodanig, dat voor $z > M$ geldt $\frac{d^2 p}{dz^2} > 1/2 \cdot \text{Sh } \alpha$ en dus

$$\frac{dp(z)}{dz} - \frac{dp(M)}{dz} > 1/2 \cdot \text{Sh } \alpha (z - M)$$

waaruit volgt

$$\lim_{z \rightarrow +\infty} \frac{dp(z)}{dz} = +\infty.$$

Analoog volgt hieruit nu (13) met $\alpha = +\infty$. Gegeven was evenwel, dat voor de integraalkromme (13) geldt, waarin α eindig, waarmee we een tegenstrijdigheid vinden. Dus volgt $\alpha = 0$. De enige integraalkromme die begrensd blijft voor $z \rightarrow +\infty$ en een afgeleide nul heeft voor $z = z_0$ heeft dus noodzakelijk de z -as als asymptoot. Maar voor $\mathcal{K}$ (rechts van D) geldt $\frac{d^2 p}{dz^2} > 0$, zal de eerste afgeleide, absoluut genomen, monotone afnemen, en heeft dus voor $z \rightarrow +\infty$ een limiet β . Als boven volgt $\beta = 0$ (anders divergentie). Dus voldoet $\mathcal{K}$ aan de randvoorwaarde (10).

Geen belichting.

Dan is in (7) $J=0$. Door de substitutie

$$\left. \begin{aligned} z &= bx \\ \lambda &= \frac{\mu}{b} \end{aligned} \right\} \quad \text{met } b^2 = \frac{8\pi \varepsilon^2 n_0}{kT}$$

herleiden we tot

$$(14) \quad 2m \frac{d^2 \log m}{dx^2} - m^2 + 1 = 0$$

Overgang op $p = \log m = \log \frac{n}{n_0}$ geeft nu

$$(15) \quad \frac{d^2 p}{dz^2} = \text{Sh } p$$

Als voor vergelijking (8) kunnen we in het p - z -vlak de meetkundige plaats K van de buigpunten der oplossingskrommen beschouwen. De vergelijking van K is $\text{Sh } p = 0$, ofwel $p = 0$. K valt hier samen met de z -as.

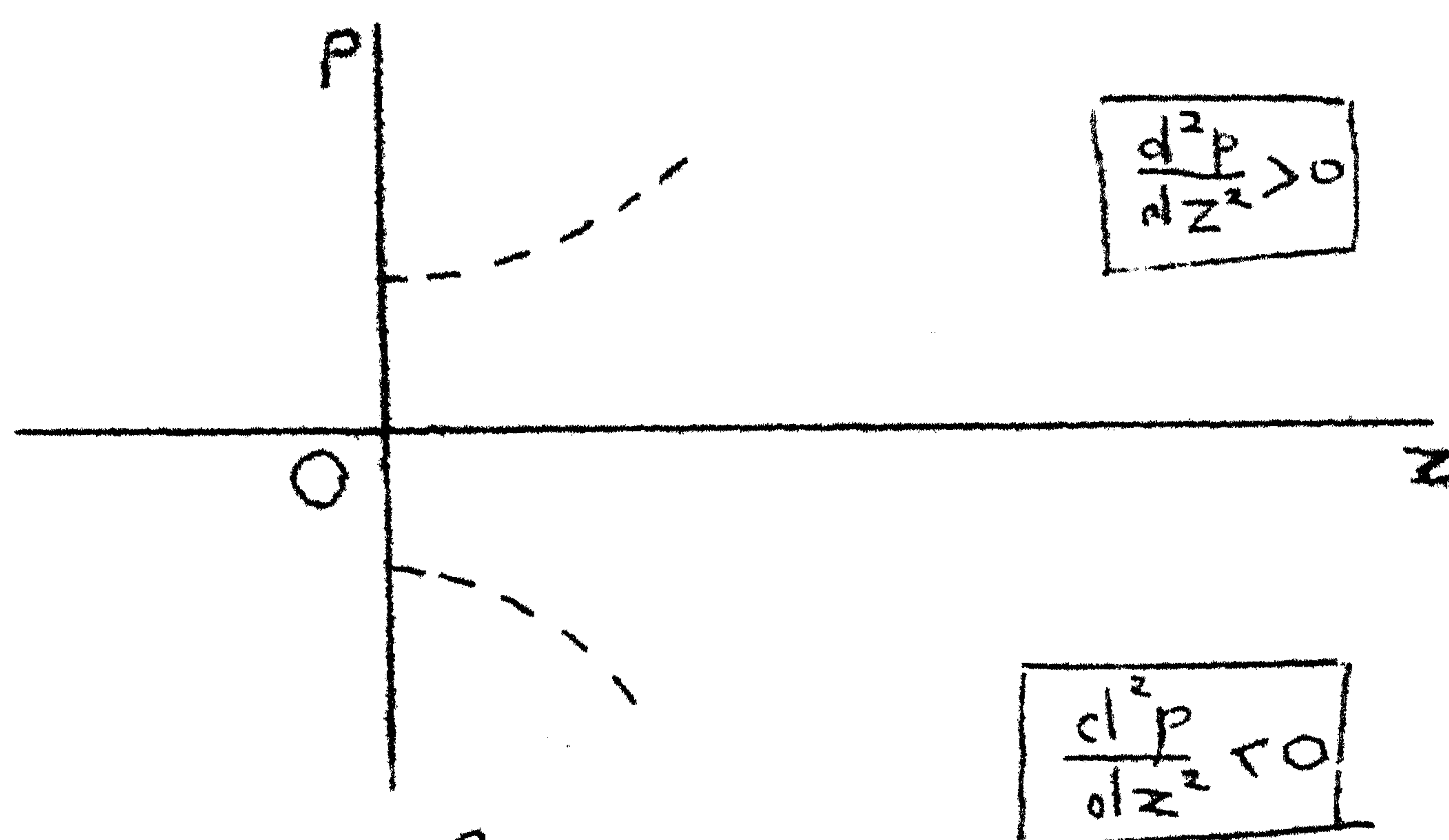


fig. 2

Boven de z -as is voor de integraalkrommen $\frac{d^2 p}{dz^2} > 0$, beneden de z -as is $\frac{d^2 p}{dz^2} < 0$. Een oplossing, die in een punt (p, z) , dat niet op de z -as ligt, een afgeleide nul heeft zal zeker divergeren, evenals zijn afgeleide.

Opdat een integraalkromme voldoet aan de randvoorwaarden

$$(16) \quad \frac{dp}{dz} = 0 \quad \text{voor } z=0 \quad \text{en} \quad \lim_{z \rightarrow +\infty} \frac{dp(z)}{dz} = 0$$

kan voldoen, moet de kromme noodzakelijk in de oorsprong horizontaal beginnen. Dan valt hij evenwel samen met de z -as en we vinden als enigste oplossing van (15) onder de randvoorwaarden (16) de oplossing $p=0$, corresponderend met $m=1$ en $n=n_0$, juist wat we gezien het natuurkundig probleem zouden verwachten.

Tot de zelfde conclusie komen we aan de hand van de algemene oplossing van vergelijking (14): vooreerst de singuliere oplossing $m=1$ en verder

$$(17) \quad m = 2/3 \alpha + \wp\left(\frac{z-\beta}{2}\right)$$

waarin $\wp(z)$ de z.g. $\wp$ -functie van Weierstrass voorstelt met gewichten

$$g_2 = 4/3 \cdot (4\alpha^2 - 3)$$

$$g_3 = 8/27 \cdot (9\alpha^2 - 8)\alpha$$

In (17) is β willekeurig en $-\infty < \alpha < +1$. De oplossing (17) is periodiek (de periode ω verloopt van $+\infty$ naar 0 als α zich beweegt van $+1$ naar $-\infty$) en heeft in elk interval ter lengte ω een pool van de tweede orde. Dus (17) levert geen fysisch aanvaardbare oplossing, en $m=1$ is dus de enige oplossing van (14), die **bruikbaar** is. Deze voldoet bovendien aan de geldende randvoorwaarden.

Bepaling van de oplossing van (8) onder randvoorwaarden (9) en (10).

De volgende methode zal zeker tot een oplossing leiden:

In het p - z -vlak kiezen we als beginpunt van de gezochte oplossingskromme een op het oog geschikt punt C op de lijn $z=z_0$ (Natuurlijk met C tussen K en de z -as; zie fig. 1). De aldaar horizontaal beginnende oplossing van (8) wordt numeriek naar rechts voortgezet (bij een tweede-orde differentiaalvergelijking van de gedaante $p'' = f(p, z)$ gaat dit zelfs bijzonder gemakkelijk). Deze oplossing zal spoedig divergent blijken te zijn b.v. naar het positief oneindige. We kiezen vervolgens een punt C_1 op $z=z_0$ even beneden het punt C . Dan zal de oplossing bijvoorbeeld naar het negatief oneindige divergeren. Het ware beginpunt C_{z_0} zal dan tussen C en C_1 gelegen zijn. Stapsgewijze verder gaand kunnen we C_{z_0} steeds verder benaderen. Daar in de berekening opvolgend optredende oplossingen van (8) de gezochte oplossing steeds beter benaderen, zal divergentie eerst merkbaar zijn voor een met iedere stap groter wordende waarde van z . Elke volgende stap vereist dus meer berekening.

Deze methode is zeer omslachtig en we zullen hem door een betere vervangen. Opgemerkt zij nog, dat

$$(18) \quad p(z_0) = \frac{\mathcal{E}}{kT} \cdot V,$$

waarin V het potentiaalverschil tussen de uiteinden van het kristal voorstelt. Met een eerste benadering van het punt C_{z_0} vinden we dus een eerste benadering van V , dus juist de grootheid, die in het experiment gemeten wordt.

Asymptotische ontwikkeling.

Het is zeer belangrijk om een asymptotische ontwikkeling te kennen van de oneindig veel (één parameter) gezochte oplossingen van (8). In dat geval kunnen we n.l. voor de (ene) parameter in de asymptotische ontwikkeling een of andere waarde nemen, waarmee een in het oneindige begrensde oplossing van (8) correspondeert, die door de asymptotische ontwikkeling voor grote z zeer nauwkeurig bekend is. Vanaf deze waarde van z zetten we nu deze oplossing numeriek naar links voort, zolang tot de eerste afgeleide nul wordt in $z=z_1$. We hebben dan een oplossing van (8), die aan (10) en aan (9) voor $z_0=z_1$ voldoet. Door de parameter in de asymptotische ontwikkeling te variëren vinden we alle gezochte oplossingen van (8).

We onderzoeken dus het gedrag voor grote waarde van z van de oplossingen van (8), die aan (10) voldoen. Overwegingen analoog met die op blz. 4 leren, dat (10) dan impliceert

$$(19) \quad \lim_{z \rightarrow +\infty} p(z) = 0$$

Nu kunnen we (8) schrijven volgens

$$(20) \quad \frac{d^2 p}{dz^2} - p = \frac{p^3}{3!} + \frac{p^5}{5!} + \dots - e^{-\lambda z} (1 - p + \frac{p^2}{2!} - \frac{p^3}{3!} + \dots) ,$$

en een oplossing van (20) met bijconditie (19) zal voor grote z met goede benadering voldoen aan

$$(21) \quad \frac{d^2 p}{dz^2} - p = -e^{-\lambda z}$$

Hieraan voldoet $-\frac{1}{\lambda^2 - 1} \cdot e^{-\lambda z}$. Dus is de algemene oplossing

$$Ae^z + Be^{-z} - \frac{1}{\lambda^2 - 1} e^{-\lambda z} \quad 1)$$

Wegens (19) kiezen we $A=0$. Beschouw nu een betere benadering van (20)

$$(22) \quad \frac{d^2 p}{dz^2} - p = e^{-\lambda z} (p - 1) .$$

Nu is

$$(23) \quad Be^{-z} - \frac{1}{\lambda^2 - 1} e^{-\lambda z}$$

voor (21) de ware oplossing en dus voor (22) een benaderde oplossing (alles voor grote z en kleine $p(z)$ natuurlijk). Vervangen we in het rechterlid van (22) p door deze benadering

$$(24) \quad \frac{d^2 p}{dz^2} - p = e^{-\lambda z} (Be^{-z} - \frac{1}{\lambda^2 - 1} e^{-\lambda z} - 1)$$

en lossen we deze resulterende differentiaalvergelijking op dan zal het resultaat beter aan (22) en dus aan (20) voldoen dan (23). De algemene oplossing van (24) is

$$(25) \quad p = \frac{B}{\lambda(\lambda+2)} \cdot e^{-(\lambda+1)z} - \frac{1}{(\lambda^2-1)(4\lambda^2-1)} \cdot e^{-2\lambda z} - \frac{1}{\lambda^2-1} e^{-\lambda z} + Ce^{-z} + De^z. \quad 2)$$

Wegens (19) stellen we weer $D=0$. Aldus voortgaande komen we tot de bevinding, dat de asymptotische ontwikkeling van de oplossingen van (8), die aan (10) en dus aan (19) voldoen, voor λ verschillend van $1/n$ de volgende gedaante heeft

$$(26) \quad p \sim \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} a_{jk} e^{-jz} e^{-\lambda kz}$$

1) tenzij $\lambda=1$. Dan wordt n.l. de algemene oplossing

$$\frac{Ae^z + Be^{-z} + 1/2 \cdot ze^{-z}}{\dots}$$

2) Dit geldt niet voor $\lambda=1$ en $\lambda=1/2$. Voor $\lambda=1$ beschouwen we i.p.v.

(24) de vergelijking

$$p'' - p = e^{-z} (Be^{-z} + 1/2 ze^{-z} - 1)$$

met algemene oplossing

$$1/2 \cdot ze^{-z} + 1/6 ze^{-2z} + 1/9 (3B+2) e^{-2z} + Ce^{-z} + De^z .$$

waarin wegens (19) $a_{00}=0$. Om de coëfficiënten a_{jk} te bepalen substitueren (26) in (20) en stellen de coëfficiënten van $e^{-jz}e^{-\lambda kz}$ nul. Met de aldus verkregen vergelijkingen in de coëfficiënten a_{jk} kan a_{jk} ($j, k=1, 2, 3, \dots$) eenduidig worden uitgedrukt in $a_{10}=A$. Met de verkregen a_{jk} voldoet (26) formeel aan (20) en dus aan (8); uit de beschouwingen van blz. 7 volgt, dat de gevonden ontwikkeling de asymptotische ontwikkeling is van de gezochte oplossingen.

Uit (26) volgt

$$\begin{aligned}
 p &= a_{10}e^{-z} + a_{01}e^{-\lambda z} + a_{20}e^{-2z} + a_{11}e^{-(1+\lambda)z} + a_{02}e^{-2\lambda z} + \\
 &\quad a_{30}e^{-3z} + a_{21}e^{-(2+\lambda)z} + a_{12}e^{-(1+2\lambda)z} + a_{03}e^{-3\lambda z} + \dots \\
 \frac{d^2 p}{dz^2} &= -a_{10}e^{-z} - \lambda a_{01}e^{-\lambda z} - 2a_{20}e^{-2z} - (1+\lambda)a_{11}e^{-(1+\lambda)z} - 2\lambda a_{02}e^{-2\lambda z} - \\
 &\quad - 3a_{30}e^{-3z} - (2+\lambda)a_{21}e^{-(2+\lambda)z} - (1+2\lambda)a_{12}e^{-(1+2\lambda)z} - 3a_{03}e^{-3\lambda z} - \dots \\
 p^2 &= a_{10}^2 e^{-2z} + 2a_{01}a_{10}e^{-(1+\lambda)z} + a_{01}^2 e^{-2\lambda z} + \\
 &\quad + 2a_{10}a_{20}e^{-3z} + 2a_{10}a_{11}e^{-(2+\lambda)z} + 2a_{10}a_{02}e^{-(1+2\lambda)z} + 2a_{01}a_{20}e^{-(2+\lambda)z} + \\
 &\quad + 2a_{01}a_{11}e^{-(1+2\lambda)z} + 2a_{01}a_{02}e^{-3\lambda z} + \dots \\
 p^3 &= a_{10}^3 e^{-3z} + 3a_{10}^2 a_{01}e^{-(2+\lambda)z} + 3a_{10}a_{01}^2 e^{-(1+2\lambda)z} + a_{01}^3 e^{-3\lambda z} + \dots
 \end{aligned}$$

De weggelaten termen zijn (voor $z \rightarrow +\infty$) van een lagere orde dan e^{-4z} of $e^{-4\lambda z}$. Vullen we deze ontwikkelingen in (20) in, dan vinden we voor $\lambda \neq 1/n$ ($n=1, 2, 3, \dots$) de volgende vergelijkingen

$a_{10} - a_{10} = 0$	uit de coëfficiënt van e^{-z}
$a_{01}(\lambda^2 - 1) = -1$	„ „ „ „ $e^{-\lambda z}$
$a_{20}(4 - 1) = 0$	„ „ „ „ e^{-2z}
$a_{11}\lambda(\lambda + 2) = a_{10}$	„ „ „ „ $e^{-(1+\lambda)z}$
$a_{02}(4\lambda^2 - 1) = a_{01}$	„ „ „ „ $e^{-2\lambda z}$
$a_{30}(9 - 1) = 1/6 \cdot a_{10}^3$	„ „ „ „ e^{-3z}
$a_{21}((2+\lambda)^2 - 1) = 1/2 \cdot a_{10}^2 a_{01} + a_{20} - 1/2 \cdot a_{10}^2$	„ „ „ „ $e^{-(2+\lambda)z}$
$a_{12}((1+2\lambda)^2 - 1) = 1/2 \cdot a_{10} a_{01}^2 + a_{11} - a_{10} a_{01}$	„ „ „ „ $e^{-(1+2\lambda)z}$
$a_{03}(9\lambda^2 - 1) = 1/6 \cdot a_{01}^3 + a_{02} - 1/2 \cdot a_{01}^2$	„ „ „ „ $e^{-3\lambda z}$

N.B. We berekenen hieruit de coëfficiënten a_{jk} . De coëfficiënt van a_{jk} in de vergelijking bij $e^{-(j+\lambda k)z}$ is $((j+\lambda k)^2 - 1)$. Zij nu

$\lambda = \text{rationaal} = p/q$ (p, q onderling ondeelbaar),
 Dan en alleen dan is $e^{-(j+\lambda k)z} = e^{-(m+\lambda n)z}$ als

$$\left. \begin{aligned} m &= j_1 = j - lp \\ n &= k_1 = k + lq \end{aligned} \right\} (l = \pm 1, \pm 2, \dots); \text{ wegens } m \geq 0 \text{ is } lp \geq j. \text{ Enzovo } lq \geq -k$$

en moeten we dus eigenlijk niet de coëfficiënt van $e^{-(j+\lambda k)z}$ nulstellen, maar de som van de coëfficiënten van $e^{-(j_1+\lambda k_1)z}$. Evenwel is de resulterende dubbelreeks wezenlijk een enkelvoudige reeks $\sum_{k=1}^{\infty} c_k e^{-k \frac{z}{n}}$. Eist men, dat de laatste reeks formeel aan (20) voldoet, dan zijn daarvoor de c_k op een parameter na bepaald. Daar de nu volgende reeks (27) formeel aan (20) voldoet, ook als λ rationaal is, levert nu (27) juist deze enkelvoudige reeks met één parameter.

Na berekening van de coëfficiënten a_{jk} vinden we voor $p(z)$ de volgende asymptotische ontwikkeling, waarin $A=a_{10}$ willekeurig is.

$$(27) \quad p(z) = A e^{-z} - \frac{1}{\lambda^2 - 1} e^{-\lambda z} + \frac{1}{\lambda(\lambda + 2)} A e^{-(1+\lambda)z} - \frac{1}{(\lambda^2 - 1)(4\lambda^2 - 1)} e^{-2\lambda z} + \\ + \frac{1}{48} A^3 e^{-3z} - \frac{\lambda^2}{2(\lambda^2 - 1)(\lambda + 1)(\lambda + 3)} A^2 e^{-(2+\lambda)z} + \\ + \frac{4\lambda^4 + 4\lambda^3 - 5\lambda^2 - 2\lambda + 2}{8\lambda^2(\lambda + 1)^3(\lambda - 1)^2(\lambda + 2)} A e^{-(1+2\lambda)z} - \frac{(18\lambda^4 - 23\lambda^2 + 8)e^{-3\lambda z}}{6(\lambda^2 - 1)^3(4\lambda^2 - 1)(9\lambda^2 - 1)} + \dots$$

De eerste vier termen ontmoetten we reeds in (25). Het blijkt, dat in (25) moet gelden $B=C$ opdat de daar gegeven benadering nog aan de differentiaalvergelijking voldoet op termen $O(e^{-3z})$ en $O(e^{-3\lambda z})$ na.

Hoe is de asymptotische ontwikkeling van de oplossing $p(z)$ in het geval $\lambda = \frac{1}{n}$ (met n geheel en positief)? Voortzetting van de gedachtegang begonnen op blz. 7 (noot 1 en 2) leidt tot een asymptotische ontwikkeling van de volgende gedaante.

$$(28) \quad \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} (a_{jk}^{(0)} + a_{jk}^{(1)} z + a_{jk}^{(2)} z^2 + \dots + a_{jk}^{(r)} z^r) e^{-(j+\lambda k)z}$$

waarbij $r \leq j + \lambda k$. We berekenen de coëfficiënten $a_{jk}^{(1)}$ verder niet (~~onnodig v.g. blz. 40~~). Heel ruw zullen we laten zien hoe in (28) met $\lambda = 1$ de polynoomcoëfficiënten ontstaan gedacht kunnen worden uit een limietovergang $\lambda \rightarrow 1$ in (27).

Beschouw daartoe voor $\lambda \neq \frac{1}{n}$ een benadering van de oplossing $p(z)$ gegeven door de eerste vier termen van (27).

$$p(z) \approx e^{-z} \left[A \frac{e^{-(\lambda - 1)z}}{\lambda^2 - 1} \right] + \frac{e^{-(1+\lambda)z}}{\lambda(\lambda + 2)} \left[A \frac{\lambda(\lambda + 2)}{(\lambda^2 - 1)(4\lambda^2 - 1)} e^{-(\lambda - 1)z} \right]$$

en stel nu $A = \alpha + \frac{1}{2(\lambda - 1)}$, waarin we α constant houden. We gaan gemakkelijk na

$$\lim_{\lambda \rightarrow 1} \left[\alpha + \frac{1}{2(\lambda - 1)} - \frac{1}{\lambda^2 - 1} e^{-(\lambda - 1)z} \right] = \alpha + \frac{1}{4} + \frac{z}{2}$$

$$\lim_{\lambda \rightarrow 1} \left[\alpha + \frac{1}{2(\lambda - 1)} - \frac{\lambda(\lambda + 2)}{(\lambda^2 - 1)(4\lambda^2 - 1)} e^{-(\lambda - 1)z} \right] = \alpha + \frac{11}{12} + \frac{z}{2}$$

*) Voor $\lambda \neq \frac{1}{n}$ blijft de coëfficiënt A van e^{-z} onbepaald. De coëfficiënten van $e^{-K\lambda z} = e^{-pz}$ met $p < 1$ zijn eenduidig bepaald.

en dus voor $\lambda = 1$ vinden we voor grote z een goede benadering voor de gezochte oplossingen van (8) in de vorm

$$p \quad (\beta + 1/2 \cdot z)e^{-z} + (\beta + 2/3 + 1/2 \cdot z)e^{-2z}$$

Hoe leggen we nu in (27) de parameter λ vast, dat de corresponderende oplossing van (8) behalve aan (10) ook aan (9) met gegeven z_0 voldoet? Voor negatieve waarden van z_0 (dus, wegens $z_0 = -\log 1/2 \cdot J$, voor $J = \frac{\lambda_1}{\lambda_2} > 2$) is de enigste methode, dat we λ variëren en de bijbehorende waarde $z_0(\lambda)$ bepalen op de op blz. 6 aangeduide wijze. Hieruit volgt de waarde van $J = \frac{\lambda_1}{\lambda_2}$, welke correspondeert met de (automatisch bij λ gevonden) oplossing.

Voor $J < 1$ bestaat er een andere methode, die we direct zullen aangeven. Nu vragen we ons af of het voor de in de praktijk voorkomende waarden van λ (b.v. $\lambda = \frac{1}{20}$) het nodig is om rekening te houden met de mogelijkheid, dat geldt $\lambda = \frac{1}{n}$. In (28) worden nu de termen van de laagste orde gegeven door

$$\sum_{k=1}^{n-1} a_{0k} e^{-\lambda k z} = \sum_{k=1}^{n-1} a_{0k} e^{-\frac{k}{n} z}$$

en de coëfficiënten a_{0k} ($k=1, 2, \dots, n-1$) zijn hier de zelfde als de overeenkomstige in (27), genomen voor $\lambda = \frac{1}{n}$ (in het bijzonder zijn deze a_{0k} getallen en geen polynomen van de graad ≥ 1). Het schijnt niet nodig voor $\lambda = 1/n$ (n geheel, positief en b.v. groter dan 10) om naast (27) nog de ontwikkeling (28) te berekenen. Evenwel zijn voor $k \leq n-1$ de coëfficiënten a_{0k} eenduidig bepaald. Om de oplossing (in verband met randvoorwaarde (9)) te kunnen variëren, moeten nog meer termen in de berekening worden meegenomen. De situatie is in dit geval dus niet zeer gunstig.

Hoewel in het experiment inderdaad geldt $J > 2$ d.w.z. $z_0 < 0$, is het theoretisch interessant te weten hoe de functie $V(J)$ zich gedraagt voor kleine waarden van J (dus $J \ll 1$), als V het potentiaalverschil tussen de beide uiteinden van het kristal voorstelt. Nu geldt $V(J) = \frac{kT}{e} p(z_0)$ met $\lambda z_0 = -\log \frac{1}{2} J$ en $p(z)$ de oplossing van (8) met randvoorwaarden (9) en (10). We willen nu $p(z_0)$ onderzoeken voor positieve waarden van z_0 . We veronderstellen z_0 zo groot, dat nog voor $z = z_0$ in (27) de eerste termen voldoende snel afnemen. We kunnen bijvoorbeeld als eis stellen $\lambda z_0 > 2$ (wegens $\lambda < 1$ geldt $\lambda z_0 < z_0$) d.w.z. $J < \frac{2}{e^2} = 0,3$. In dat geval kunnen we in (27) de parameter λ bepalen uit de randvoorwaarde (9) door (27) te differentieren naar z voor $z = z_0$ en de uitkomst nul te stellen.

$$(29) \quad 0 = -A e^{-z_0} + \frac{\lambda}{\lambda^2 - 1} e^{-\lambda z_0} - A \frac{\lambda + 1}{\lambda(\lambda + 2)} e^{-(1+\lambda)z_0} + \frac{2\lambda e^{-2\lambda z_0}}{(\lambda^2 - 1)(4\lambda^2 - 1)} + \dots$$

De hieruit af te leiden functie $A(z_0)$ denken we ons ontwikkeld volgens

$$(30) \quad A(z_0) = e^{-\lambda z_0} (b_1 e^{-\lambda z_0} + b_2 e^{-2\lambda z_0} + \dots)$$

en wel kiezen we deze gedaante omdat in (29) wezenlijk een functioneel verband is aangegeven tussen Ae^{-z_0} en $e^{-\lambda z_0}$. Invullen van (30) in (29) en nulstelling van de coëfficiënt van $e^{-n\lambda z_0}$ ($n=1,2,\dots$) geeft een serie vergelijkingen in $b_1, b_2, \dots$ waaruit deze kunnen worden opgelost. We vinden o.a.

$$(31) \quad b_1 = \frac{\lambda}{\lambda^2 - 1}$$

$$(32) \quad b_2 = -\frac{4\lambda^2 + 6\lambda + 1}{(\lambda + 1)(\lambda + 2)(4\lambda^2 - 1)}$$

en dus geldt voor grote λz_0 in goede benadering

$$A(z_0) \approx \frac{\lambda}{\lambda^2 - 1} e^{-(1-\lambda)z_0}$$

en dus voor $z \geq z_0$ geldt dan

$$(33) \quad p(z) \approx Ae^{-z} \frac{1}{\lambda^2 - 1} e^{-\lambda z} = \frac{e^{-\lambda z_0}}{\lambda^2 - 1} \left[\lambda e^{-(z-z_0)} - e^{-\lambda(z-z_0)} \right]$$

Speciaal geldt (op termen van kleinere orde na):

$$(34) \quad p(z_0) = \frac{e^{-\lambda z_0}}{\lambda + 1}$$

en dus volgt voor het potentiaalverschil V (wegens $z_0 = -\log 1/2 \cdot J$ en $\lambda = \frac{\mu}{b}$)

$$V = \frac{kT}{\epsilon} p(z_0) = \frac{kT}{\epsilon} \frac{e^{-\lambda z_0}}{1 + \lambda} = \frac{kT}{\epsilon} \frac{\frac{1}{2} J}{1 + \frac{\mu}{b}}$$

Hierin is volgens blz. 2 $b = 2\epsilon \sqrt{\frac{2\pi n_0}{kT}}$, zodat

$$(35) \quad V = \frac{kTJ}{2\epsilon + \mu \sqrt{\frac{kT}{2\pi n_0}}}$$

Deze formule bepaalt de maklijn in het punt $J=0$ aan de grafiek van $V=V(J)$. Daar (35) slechts geldig is als ongeveer $J \leq 0,3$, kan (35) waarschijnlijk niet experimenteel worden getoetst.

N.B. Ook in (33) zien we, dat voor $\lambda \rightarrow 1$ $p(z)$ eindig blijft (analoog voor $\lambda \rightarrow \frac{1}{n}$). Immers ontwikkeling van de e -machten in (33) geeft

$$p(z) \approx \frac{e^{-\lambda z_0}}{\lambda + 1} \left(1 + \sum_{n=2}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{n!} (z - z_0)^n \sum_{k=1}^{n-1} \lambda^k \right)$$

en dus voor $\lambda \rightarrow 1$ krijgen we

$$p(z) \approx \frac{1}{2} \cdot \frac{e^{-z_0}}{\lambda + 1} \left(1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n-1}}{n(n-2)!} \cdot (z-z_0)^n \right)$$

$$p(z) \approx \frac{1}{2} e^{-z_0} ((z-z_0) e^{-(z-z_0)} + e^{-(z-z_0)})$$

$$p(z) \approx \frac{1}{2} (1+z-z_0) e^{-z}.$$

Op blz. 7 (noot 1) bepaalden we voor $\lambda = 1$ een benadering van $p(z)$ van analoge gedaante.

Over een iteratiemethode gebezigd door den Heer R. van Lieshout, om oplossingen van (8) te verkrijgen. Essentieel komt deze op het volgende neer. Zij Θ een operator, toe te passen op de functie $p(z)$, met

$$\Theta p(z) = \ln \left[\frac{d^2 p}{dz^2} + \sqrt{\frac{d^2 p}{dz^2} + 1 + 2e^{-\lambda z}} \right]$$

Dan is (8) equivalent met

$$(36) \quad p = \Theta p.$$

Zij p_0 een benaderde oplossing van (36). Vorm dan achtereenvolgens

$$p_1 = \Theta p_0$$

$$p_2 = \Theta p_1$$

$$p_{n+1} = \Theta p_n$$

Voor elk interval, waar de rij $p_0, p_1, \dots, p_n$ (mede met de corresponderende rijen der eerste en tweede afgeleiden) gelijkmatig convergeert, zal de limietfunctie aan (36) voldoen.

Als eerste benadering kiezen we

$$(37) \quad p_0 = \ln \sqrt{1 + 2e^{-\lambda z}}$$

Immers uit (2) en (3) volgt

$$4\pi \varepsilon (N-n) = - \frac{kT}{\varepsilon} \frac{d^2 \log n}{dx^2} = - \frac{kT}{\varepsilon} \frac{d^2 p}{dx^2}$$

Nu is de ruimtelading per cm^3 in het kristal niet zeer groot. Daarom stellen we in eerste instantie $\frac{d^2 p}{dx^2} = 0$ en dus $\frac{d^2 p}{dz^2} = 0$ (v.g.l. fig. 1; $\mathcal{K}$ heeft steeds een flauwe kromming, met tegengesteld teken links en rechts van D). dus geldt

$$p = \Theta p \approx \ln \sqrt{1 + 2e^{-\lambda z}},$$

vandaar de in (37) gemaakte keuze.

Opm. Voor grote z voldoet $p_0 = \ln \sqrt{1 + 2e^{-\lambda z}}$ aan (8) met een relatief grote fout. Immers dan is

$$p_0 = e^{-\lambda z} - 2e^{-2\lambda z} + O(e^{-3\lambda z})$$

en

$$\text{Sh } p = e^{-\lambda z} e^{-p} = e^{-2\lambda z} + O(e^{-3\lambda z})$$

terwijl

$$\frac{d^2 p}{dz^2} = -\lambda e^{-\lambda z} + o(e^{-2\lambda z})$$

en het verschil der beide leden van (8) na substitutie van p_0 is dus $\lambda e^{-\lambda z} + o(e^{-2\lambda z})$, dus van de zelfde orde als p_0 zelf.

Uit (27) volgt (wegens $\lambda < 1/2$), dat op een fout $o(e^{-2\lambda z})$ na, $p(z)$ voor grote z gegeven wordt door

$$\frac{1}{1-\lambda^2} e^{-\lambda z}$$

en wel voor alle oplossingen van (8), die aan (10) voldoen. De door den heer van Lieshout met genoemde iteratiemethode verkregen reeks 1)

$$p(z) = \ln(\sqrt{1+2e^{-\lambda z}}) + \ln \left[1 + \alpha f(e^{-\lambda z}) + \alpha^2 g(e^{-\lambda z}) + \alpha^3 h(e^{-\lambda z}) + \dots \right]$$

met $f=o(e^{-\lambda z})$, $g=o(e^{-2\lambda z})$, etc., moet dus zodanig zijn, dat

$$f(e^{-\lambda z}) = \frac{1}{\alpha} \cdot \frac{\lambda^2}{\lambda^2 - 1} e^{-\lambda z} + o(e^{-2\lambda z})$$

Convergeert de gevolgde iteratiemethode? In het algemeen is de verkregen reeks $p_0, p_1, \dots, p_n, \dots$ hoogstens asymptotisch convergent naar een oplossing van (8). We zullen eens nagaan in hoeverre de uit de nulde benadering (37) afgeleide eerste benadering $p_1(z)$ asymptotisch beter voldoet dan (37).

Wij weten, dat de oplossingen van (8), die aan (10) voldoen, een asymptotische ontwikkeling hebben volgens (26). Dus, daar $\lambda < 1$, geldt

$$\frac{d^2 p}{dz^2} = \sum_{k=1}^{\infty} a_{ik} (i + \lambda k)^2 e^{-iz} e^{-\lambda k z} = o(e^{-\lambda z})$$

en we kunnen (36) dus asymptotisch schrijven als

$$p = \ln(p'' + \sqrt{p''^2 + 1 + 2e^{-\lambda z}}) = \ln(1 + p'' + e^{-\lambda z} + o(e^{-2\lambda z})),$$

dus (36) kan asymptotisch geschreven worden als

$$(38) \quad p = p'' + e^{-\lambda z} + o(e^{-2\lambda z}),$$

hetgeen overigens ook direct uit (8) volgt.

Als p_0 een nulde benadering is, dan volgt dus voor de hieruit afgeleide eerste benadering

$$p_1 = p_0'' + e^{-\lambda z} + o(e^{-2\lambda z}),$$

en deze voldoet aan (38) met een fout

$$p_1 - p_1'' - e^{-\lambda z} + o(e^{-2\lambda z}) = p_0'' - p_0''' + \lambda e^{-\lambda z} + o(e^{-2\lambda z}).$$

1) Essentieel blijkt deze een functie van $e^{-\lambda z}$. Ontwikkelen we voor grote z naar $e^{-\lambda z}$, dan moeten we juist (27) krijgen voor $A=0$. Bovenstaande reeks kan worden opgevat, als een omvorming van (27) voor $A=0$, door op een handige wijze termen bijeen te nemen, zodanig, dat het resultaat ook bruikbaar is voor kleinere waarden van z .

De analoge fout voor p_0 is

$$p_0 - p_0'' - e^{-\lambda z} + O(e^{-2\lambda z})$$

en de eerste stap van de benadering geeft dus asymptotisch een verbeterde oplossing als

$$(39) \quad |-p_0''' + p_0'' + \lambda e^{-\lambda z}| < |p_0 - p_0'' - e^{-\lambda z}| + O(e^{-2\lambda z}).$$

En nu geldt voor (37) $p_0 = e^{-\lambda z} + O(e^{-2\lambda z})$, dus het criterium (39) wordt

$$|\lambda^2 - \lambda^4 + \lambda| < |1 - \lambda^2 - 1| + O(e^{-\lambda z})$$

of daar $0 < \lambda < 1$

$$\lambda(\lambda + 1 - \lambda^3) < \lambda^2 + O(e^{-\lambda z})$$

waaraan voor $\lambda < 1$ niet voldaan is.

N.B. Bezwaren tegen de oplossing I van blz. 13 zijn:

1. We krijgen slechts één oplossing van (8), die aan de randvoorwaarde (10) voldoet. Immers ω is een constante, vastgelegd door natuur- en materiaalconstanten. Ook de opmerking in de voetnoot op blz. 13 laat uitkomen, dat I niet meer dan één oplossing van (8) kan leveren.

Evenwel moeten we bij elke negatieve waarde van z_0 een oplossing van (8) bepalen, die aan (9) en (10) voldoet. In de eerste plaats moeten we dus beschikken over een asymptotische of expliciete voorstelling van de oneindig veel oplossingen van (8), die aan (10) voldoen. Wellicht is dit met de iteratiemethode te bereiken door uit te gaan van een heel skala van nulde benaderingen p_0 , alle zoveel mogelijk gelijk aan

$$\frac{1}{1-\lambda^2} e^{-\lambda z} + O(e^{-2\lambda z}), \quad \text{voor } z \rightarrow \infty$$

Op elk van deze passen we de iteratiemethode toe in de hoop oneindig vele verschillende oplossingen van (8) te krijgen, zo dat voor elk negatief getal z_0 een hunner een afgeleide nul heeft voor $z = z_0$.

2. Het is lang niet zeker, dat de zeer speciale oplossing I (zie blz. 13) in enig punt een afgeleide nul heeft. Er zijn n.l. oplossingen van (8), die aan (10) voldoen, doch in geen enkel punt een afgeleide nul hebben.

Beschouw b.v. een kristal, dat alle ruimte inneemt (en zich dus in het bijzonder uitstrekt van $x = -\infty$ tot $x = +\infty$), en waar bij een abscis x een lichtsterkte $E e^{-\lambda x}$ ($-\infty < x < +\infty$) heerst. Indien in dit (niet realiseerbare) geval een stationnaire toestand intreedt, dan zal de corresponderende oplossingskromme $n(x)$ resp. $p(z)$ nergens een horizontale raaklijn hebben (in fig. 1 verloopt deze oplossingskromme voortdurend boven K).