

APLICAREA METODEI NEWTON LA REZOLVAREA PROBLEMELOR NELINIARE, CONDIȚIONALITĂȚI, CAZUL DISPOZITIVULUI SEMICONDUCTOR

APPLICATION OF THE NEWTON METHOD TO THE SOLVING OF NONLINEAR PROBLEMS, CONDITIONALITY, THE CASE OF THE SEMICONDUCTOR DEVICE

Galina SPRINCEAN, ORCID: 0000-0002-0204-1864
Universitatea de Stat din Moldova

CZU: 519.6

e_mail: galina.sprincean@usm.md

Modelarea matematică este crearea unor tehnici care permit transformarea modelelor fizice în modele numerice și presupun algoritmi ce pot fi ușor implementați prin coduri-sursă, folosind limbaje de programare corespunzătoare. În cazul diodei semiconductoare, în cadrul modelării matematice a acesteia, au trebuit rezolvate câteva subprobleme, una dintre care a fost liniarizarea ecuațiilor, soluționarea problemei în întregime presupunând rezolvarea unui sistem de trei ecuații diferențiale cu derivate parțiale, neliniare, având două tipuri de condiții la frontieră.

Metoda Newton este una dintre cele recomandate, în literatura de specialitate, la rezolvarea problemelor neliniare. Dar, anevoios de realizat sau chiar imposibil în cazul unor probleme neliniare mai speciale. Cazul diodei semiconductoare face parte din categoria acestor probleme mai speciale.

Cu utilizarea metodei Newton, într-o vecinătate bine conturată a soluției exacte, se asigură dublarea numărului de cifre exacte ale soluției calculate iterativ. Datorită acestor particularități despre metoda Newton se spune că are proprietăți locale de convergență foarte bune, dar la nivel global ar putea să se comporte foarte rău. Totuși, chiar și la rezolvarea celor mai dificile probleme neliniare metoda Newton ar putea fi utilizată ca o procedură terminală, în prima fază fiind folosită o altă metodă, mai puțin sensibilă din punctul de vedere al convergenței.

1. Formularea matematică a problemei dispozitivului semiconductor bazat pe modelul drift-difuzie (MDD)

Considerăm modelul diodei semiconductoare din *Figură*. Dioda are două regiuni cu diferite tipuri de dopare, *zona de tip p* cu o concentrație dominantă a golurilor și *zona de tip n* cu o concentrație dominantă a electronilor. Electroful anod este conectat la *zona de tip p*, iar electroful catod este conectat la *zona de tip n*.

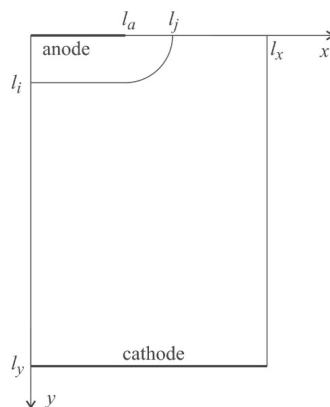


Fig. 1. Geometria diodei semiconductoare

Impuritățile adăugate materialului semiconductor determină tipul de conductibilitate a fiecărei zone. În fizica semiconductoarelor concentrația de impurități este notată cu N și definită de expresia

$$N(x) = (N_D^+ - N_A^-)m^{-3}, \quad (1.1)$$

unde N_D^+ este concentrația donatorilor ionizați, iar N_A^- semnifică concentrația acceptorilor ionizați. Valoarea negativă a concentrației impurităților este determinată de dominarea atomilor acceptori ionizați (*semiconductor de tip p*), iar o valoare pozitivă a concentrației impurităților este determinată de dominația atomilor donatori ionizați (*semiconductor de tip n*).

Modelul matematic al dispozitivului semiconductor, conform literaturii de specialitate [1], este un sistem de trei ecuații fundamentale ale fizicii dispozitivelor semiconductoare, care descriu comportarea statică și dinamică a concentrațiilor purtătorilor de sarcină în dispozitivele semiconductoare, aflate sub influența câmpurilor externe ce determină abateri de la condițiile de echilibru termic. Ecuațiile sistemului sunt prezentate mai jos:

Ecuația lui Poisson $-\nabla \cdot (\varepsilon \nabla \varphi) = q(p - n + N) \quad (1.2)$

Ecuația continuității pentru electroni $-\nabla \cdot (J_n) = -q(RG_{SRH} + RG_{AUG}) \quad (1.3)$

Ecuația continuității pentru goluri $\nabla \cdot (J_p) = -q(RG_{SRH} + RG_{AUG}) \quad (1.4)$

La rezolvarea sistemului de ecuații diferențiale, cu derivate parțiale, neliniare(1.2)-(1.4), având ca necunoscute potențialul electrostatic (φ), concentrațiile de electroni (n) și goluri (p), au fost folosite următoarele soluții analitice obținute cu rezolvarea următoarelor ecuații:

Ecuații ale densității de curent pentru electroni și goluri, respectiv:

$$J_n = J_{n \text{ drift}} + J_{n \text{ difuzie}} = q n \mu_n \bar{E} + q D_n \nabla n \quad (1.5)$$

$$J_p = J_{p \text{ drift}} + J_{p \text{ difuzie}} = q p \mu_p \bar{E} - q D_p \nabla p \quad (1.6)$$

Ecuații ale concentrației purtătorilor de sarcină pentru electroni și goluri, respectiv:

$$n = n_i \rho_n \exp\left(\frac{\varphi}{\varphi_T}\right) \quad (1.7)$$

$$p = n_i \rho_p \exp\left(-\frac{\varphi}{\varphi_T}\right) \quad (1.8)$$

Aici $\varepsilon = \varepsilon_r \varepsilon_0$ este permitivitatea absolută (*constanta dielectrică*), unde ε_r semnifică permitivitatea relativă, iar ε_0 este constanta electrică ($\varepsilon_0 = 8,854187817 \cdot 10^{-12} F \cdot m^{-1}$), q sarcina electronului pozitiv ($q = 1,602176565 \cdot 10^{-19} C$), N concentrația impurităților în semiconductor, J_n și J_p densități ale curenților de electroni și goluri, respectiv, RG_{SRH} și RG_{AUG} sunt vitezele de recombinare-generare ale perechilor electron-gol *Shockley-Hall* și *Auger*, respectiv. Valorile ratelor de recombinare-generare ale perechilor electron-gol sunt estimate conform relațiilor:

$$RG_{SRH}(n, p) = \frac{pn - n_i^2}{\tau_p(n + n_i) + \tau_n(p + n_i)}, \quad RG_{AUG}(n, p) = (pn - n_i^2)(C_n n + C_p p) \quad (1.9)$$

În cazul diodei confecționate din siliciu, τ_n și τ_p sunt timpii de existență a purtătorilor de sarcină electron și gol, respectiv ($\tau_n = \tau_p = 0.1 \cdot 10^{-6} s$), iar C_n și C_p sunt coeficienții lui Auger pentru electroni și goluri, respectiv ($C_n = 1,1 \cdot 10^{-42} m^6 s^{-1}$; $C_p = 0,3 \cdot 10^{-42} m^6 s^{-1}$ la temperatura $T = 300 K$), n_i semnifică concentrația intrinsecă a electronilor și golurilor în semiconductor ($n_i = 1,46 \cdot 10^{16} m^{-3}$), φ_T este tensiunea termică și estimată conform relației $\varphi_T = k_B T / q$, k_B este constanta lui Boltzmann ($k_B = 1,3806488 \cdot 10^{-23} J/K$, la temperatura $T = 300 K$).

Domeniul de definiție al problemei (1.2)-(1.4) a fost notat prin $\Omega = (0 < x_1 < l_{x_1}, 0 < x_2 < l_{x_2})$ cu frontiera $\Gamma = \Gamma_D \cup \Gamma_N$, unde Γ_D este porțiunea la care sunt conectați electrozii (linia mai pronunțată din *Figură*), iar Γ_N , porțiunea rămasă a frontierei. Astfel întreg domeniul de definiție a fost notat prin $\bar{\Omega} = \Omega \cup \Gamma$.

Condițiile la frontieră:

- pe porțiunea de frontieră Γ_D , acționează *condițiile lui Dirichlet*

$$\varphi(\bar{x}) = U_a + \varphi_T \ln \left(\frac{N + \sqrt{N^2 + 4n_i^2}}{2n_i} \right), \quad n(\bar{x}) = \frac{N + \sqrt{N^2 + 4n_i^2}}{2}, \quad p(\bar{x}) = \frac{-N + \sqrt{N^2 + 4n_i^2}}{2}, \quad \bar{x} \in \Gamma_D. \quad (1.10)$$

- pe porțiunea de frontieră Γ_N acționează *condițiile lui Neumann*

$$\vec{n} \cdot \nabla \varphi = \frac{\partial \varphi}{\partial n} = 0; \quad \vec{n} \cdot J_n = 0; \quad \vec{n} \cdot J_p = 0, \quad \bar{x} \in \Gamma_N. \quad (1.11)$$

unde prin punct se înțelege produsul scalar al vectorului normal exterior \vec{n} , pe porțiunea de frontieră Γ_N , la gradientul potențialului electrostatic φ și vectorilor densității de curenți pentru electroni J_n și goluri J_p .

Concentrația de impurități N a semiconductorului, pe domeniul de definiție al problemei, poate fi estimată conform relației

$$N = N_{Dn} + N_{Dnmax}G(x_1, -x_2, \infty, l_{x_1}, \alpha) - N_{Apmax}G(x_1, x_2, l_a + l_{x_2}, l_{x_2}, \alpha) \quad (1.12)$$

unde G este funcția lui Gauss, N_{Dn} alierea stratului epitaxial al semiconductorului, iar N_{Dnmax} alierea substratului epitaxial, N_{Apmax} valoarea maximală de implantare a profilului de difuziune.

Funcția lui Gauss este definită conform sistemului de mai jos [1, p. 26]:

$$G(x_1, x_2, a, b, \alpha) = \begin{cases} \exp\left[-\left(\frac{x_1 - a}{\alpha}\right)^2\right] \cdot \exp\left[-\left(\frac{x_2 - b}{\alpha}\right)^2\right], & x_1 > a \ \& \ x_2 > b \\ \exp\left[-\left(\frac{x_1 - a}{\alpha}\right)^2\right], & x_1 > a \ \& \ x_2 \leq b \\ \exp\left[-\left(\frac{x_2 - b}{\alpha}\right)^2\right], & x_1 \leq a \ \& \ x_2 > b \\ 1, & x_1 \leq a \ \text{and} \ x_2 \leq b \end{cases} \quad (1.13)$$

Constantele din relațiile (1.12), (1.13), pe domeniul de definiție (*Fig.*), au valorile $N_{Dn} = 10^{16}m^{-3}$, $N_{Dnmax} = 10^{18}m^{-3}$, $N_{Apmax} = 10^{18}m^{-3}$;

$$\alpha = 0.5 \cdot 10^{-6} m,$$

$$l_{x_1} = 5 \cdot 10^{-6} m, \ l_{x_2} = 7 \cdot 10^{-6} m, \ l_a = 2 \cdot 10^{-6} m, \ l_i = l_j = 1 \cdot 10^{-6} m.$$

Se consideră catodul conectat la pământ ($U_c = 0 V$), iar la anod se aplică o tensiune $U_a > 0 V$, cu mărirea ei treptată cu pași mici.

În lipsa tensiunii aplicată la anod, soluția problemei dispozitivului semiconductor poate fi calculată conform relațiilor (1.11), (1.12) pe întreg domeniul de definiție $\bar{\Omega}$ cu $U_a = 0 V$. Această soluție poate fi folosită ca valoare inițială la rezolvarea problemei cu aplicarea metodelor iterative și mărirea treptată a U_a .

2. Soluționarea problemei în spațiul bidimensional

După discretizarea ecuațiilor diferențiale neliniare cu implementarea schemelor în diferențe, iar mai apoi și a schemei lui Scharfetter-Gummel, pentru o mai bună aproximare a lor [2, 3], a fost obținut echivalentul discret al sistemului (1.2)-(1.4), și anume, următorul sistem algebric de ecuații neliniare:

$$2\varepsilon \left(\frac{1}{h_{x_1}^2} + \frac{1}{h_{x_2}^2} \right) \varphi_{ij} - \frac{\varepsilon}{h_{x_1}^2} (\varphi_{i+1,j} + \varphi_{i-1,j}) - \frac{\varepsilon}{h_{x_2}^2} (\varphi_{i,j+1} + \varphi_{i,j-1}) =$$

$$q(p_{ij} - n_{ij} + N_{ij}) \quad (2.1)$$

$$\left(\frac{\mu_n V_{TB} \left(\frac{\varphi_{ij} - \varphi_{i+1,j}}{\varphi_T} \right) + \mu_n V_{TB} \left(\frac{\varphi_{ij} - \varphi_{i-1,j}}{\varphi_T} \right)}{h_{x_1}^2} + \frac{\mu_n V_{TB} \left(\frac{\varphi_{ij} - \varphi_{i,j+1}}{\varphi_T} \right) + \mu_n V_{TB} \left(\frac{\varphi_{ij} - \varphi_{i,j-1}}{\varphi_T} \right)}{h_{x_2}^2} \right) * n_{ij} -$$

$$\frac{\mu_n V_{TB} \left(\frac{\varphi_{i+1,j} - \varphi_{ij}}{\varphi_T} \right)}{h_{x_1}^2} * n_{i+1,j} - \frac{\mu_n V_{TB} \left(\frac{\varphi_{i-1,j} - \varphi_{ij}}{\varphi_T} \right)}{h_{x_1}^2} * n_{i-1,j} - \frac{\mu_n V_{TB} \left(\frac{\varphi_{i,j+1} - \varphi_{ij}}{\varphi_T} \right)}{h_{x_2}^2} * n_{i,j+1} -$$

$$\frac{\mu_n V_{TB} \left(\frac{\varphi_{i,j-1} - \varphi_{ij}}{\varphi_T} \right)}{h_{x_2}^2} * n_{i,j-1} = - \left(\frac{n_{ij} p_{i,j} - n_i^2}{\tau_p (n_{ij} + n_i) + \tau_n (p_{ij} + n_i)} + (n_{ij} * p_{ij} - n_i^2) * \right.$$

$$\left. (C_n n_{ij} + C_p p_{ij}) \right) \quad (2.2)$$

$$\left(\frac{\mu_p \varphi_{TB} \left(\frac{\varphi_{i+1,j} - \varphi_{ij}}{\varphi_T} \right) + \mu_p \varphi_{TB} \left(\frac{\varphi_{i-1,j} - \varphi_{ij}}{\varphi_T} \right)}{h_{x_1}^2} + \frac{\mu_p \varphi_{TB} \left(\frac{\varphi_{i,j+1} - \varphi_{ij}}{\varphi_T} \right) + \mu_p \varphi_{TB} \left(\frac{\varphi_{i,j-1} - \varphi_{ij}}{\varphi_T} \right)}{h_{x_2}^2} \right) * p_{i,j} -$$

$$\frac{\mu_p \varphi_{TB} \left(\frac{\varphi_{ij} - \varphi_{i+1,j}}{\varphi_T} \right)}{h_{x_1}^2} * p_{i+1,j} - \frac{\mu_p \varphi_{TB} \left(\frac{\varphi_{ij} - \varphi_{i-1,j}}{\varphi_T} \right)}{h_{x_1}^2} * p_{i-1,j} - \frac{\mu_p \varphi_{TB} \left(\frac{\varphi_{ij} - \varphi_{i,j+1}}{\varphi_T} \right)}{h_{x_2}^2} * p_{i,j+1} -$$

$$\frac{\mu_p \varphi_{TB} \left(\frac{\varphi_{ij} - \varphi_{i,j-1}}{\varphi_T} \right)}{h_{x_2}^2} * p_{i,j-1} = -q * \frac{n_{ij} p_{i,j} - n_i^2}{(n_{ij} + n_i) + \tau_n (p_{ij} + n_i)} +$$

$$(n_{ij} p_{i,j} - n_i^2) * (C_n n_{ij} + C_p p_{ij}) \quad (2.3)$$

În procesul discretizării, a fost aplicată o grilă pe domeniul de definiție, ca pași având h_{x_1} (pe orizontală), h_{x_2} (pe verticală) și astfel a fost obținută rețeaua de noduri $\Omega_h = \{(x_1^{(i)}, x_2^{(j)})\}$,

unde $x_1^{(i)} = (i - 1) * h_{x_1}$, $i = 2, \dots, NN$, $x_2^{(j)} = (j - 1) * h_{x_2}$, $j = 2, \dots, MM$.

Prin $\overline{\Omega}_h = \{(x_1^{(i)}, x_2^{(j)})\}$, $i = 1, \dots, NN + 1$,

$j = 1, \dots, MM + 1$, a fost notată mulțimea tuturor nodurilor, interne și de pe frontieră.

Valorile inițiale ale potențialului electrostatic (φ), concentrațiilor de electroni (n) și goluri (p) au fost calculate conform condițiilor la frontieră (1.10), (1.11), în nodurile rețelei $\overline{\Omega}_h$, cu $U_a = 0$ și notate prin $\overline{\varphi^{(in)}}$, $\overline{n^{(in)}}$, $\overline{p^{(in)}}$.

Valoarea tensiunii aplicată la anod a fost mărită treptat, cu pași mici, și recalculat valorile funcțiilor necunoscute în condițiile echilibrului termodinamic pentru $U_a \neq 0$. Noile valori au fost notate prin $\overline{\varphi^{(old)}}$, $\overline{n^{(old)}}$, $\overline{p^{(old)}}$.

Notând prin $\overline{\varphi^{(ex)}}(x_1, x_2)$ – soluția exactă a sistemului (2.1), $\overline{\varphi^{(old)}}(x_1, x_2)$ – soluția calculată la iterația precedentă, $\overline{\varphi^{(new)}}(x_1, x_2)$ – soluția calculată la iterația curentă, $\overline{\varphi^{(in)}}(x_1, x_2)$ – valoarea inițială a potențialului electrostatic și $\overline{\delta_\varphi}(x_1, x_2)$ – eroarea de calcul, au fost obținute relațiile:

$$\overline{\varphi^{(ex)}}(x_1, x_2) = \overline{\varphi^{(in)}}(x_1, x_2) + \overline{\delta_\varphi}(x_1, x_2), \quad \text{pentru prima iterație} \quad (2.4)$$

$$\overline{\varphi^{(new)}}(x_1, x_2) = \overline{\varphi^{(old)}}(x_1, x_2) + \overline{\delta_\varphi}(x_1, x_2), \quad \text{pentru iterația curentă.} \quad (2.5)$$

Liniazarea ecuațiilor sistemului algebric prin metoda lui Newton, a constat în substituția relației (2.4)/(2.5) în sistemul (2.1). Ca mai apoi, sistemul algebric obținut să fie rezolvat în necunoscuta $\overline{\delta_\varphi}(x_1, x_2)$. Celelalte funcții au fost luate ca constante, cu valori calculate la iterația/iterațiile precedentă(e). Ca metodă iterativă la rezolvarea sistemului algebric linear a fost utilizată Metoda Gradientilor Conjugați. În cazul ecuațiilor (2.2), (2.3) ale sistemului s-a procedat similar.

3. Rezultate numerice

Soluția numerică a sistemului de ecuații diferențiale, cu derivate parțiale, neliniare (1.2)-(1.4) sunt prezentate în *Fig. 2*, *Fig. 3*, *Fig. 4*. Distribuția inițială a funcțiilor φ , n , p , în regimul echilibrului dinamic (cu $U_a = 0V$), este prezentată în *Figura 2*. În *Figura 3* sunt prezentate suprafețele distribuției funcțiilor φ , n , p , pentru $U_a = 0.3V$ și o concentrație a impurităților de $N \approx 10^{23}$. În *Figura 4* sunt prezentate suprafețele distribuției funcțiilor φ , n , p la aplicarea din exterior a tensiunii $U_a = 0.6V$, pentru o concentrație a impurităților de $N \approx 10^{23}$.

Din literatura de specialitate și parțial confirmate de rezultatele obținute, o soluție convergentă a problemei cercetării, folosind metoda Newton, poate fi calculată pentru $N \approx 10^{21} - 10^{23}$, cu o tensiune de până la $U = 2 \sqrt{VU} = 2V$.

Referințe:

1. HANDBOOK of NUMERICAL ANALYSIS: SCHILDERS, W.H.A., MATEN, E.J.W *Numerical Methods in Electromagnetics*. Vol. 13, Serie's Editor: Philippe CIARLET. Netherlands: ELSEVIER, 2005. 920 p. ISSN 15708659.
2. САМАРСКИЙ, А.А. *Теория разностных схем*. Москва: Наука, 1989. ISBN 5-02-014576-9.
3. VASILESKA, D., GOODNICK, S.M., KLIMECK, G. *Computational Electronics: Semiclassical and Quantum Device Modeling and Simulation*. Amazon: CRC Press, 2010. 782 p. ISBN: 1420064835.
4. ANDREI, N. *An adaptive conjugate gradient algorithm for large-scale unconstrained optimization*. North-Holland: Elsevier - AMC, 2016. pp. 83-91. ISSN:0377-0427.

Fig. 2. Suprafețe ale potențialului φ și concentrațiilor pentru electroni n și goluri p , cu tensiune $U_a = 0V$, în regimul echilibrului termodinamic, pentru concentrații ale impurităților de $N_{Dn} = 10^{21} \cdot m^{-3}$, $N_{Dnmax} = 3 \cdot 10^{23} \cdot m^{-3}$, $N_{Apmx} = 3 \cdot 10^{23} \cdot m^{-3}$



Fig. 3. Repartiția potențialului φ și a concentrațiilor pentru electroni n și goluri p , cu tensiunea $U_a = 0.3 V$. Rezultatele au fost obținute pentru concentrații ale impurităților de $N_{Dn} = 10^{21} \cdot m^{-3}$, $N_{Dnmax} = 3 \cdot 10^{23} \cdot m^{-3}$, $N_{Apmx} = 3 \cdot 10^{23} \cdot m^{-3}$



Fig. 4. Repartiția potențialului φ și a concentrațiilor de electroni n și goluri p , cu tensiunea la anod $U_a = 0.6 V$. Rezultatele au fost obținute pentru concentrațiile impurităților de $N_{Dn} = 10^{21} \cdot m^{-3}$, $N_{Dnmax} = 3 \cdot 10^{23} \cdot m^{-3}$, $N_{Apmx} = 3 \cdot 10^{23} \cdot m^{-3}$.

