

1. Introduzione

Si presenta qui un riassunto di risultati recentemente ottenuti dagli autori per il trattamento numerico delle equazioni di continuità della corrente, equazioni che nascono in problemi di simulazione di dispositivi a semiconduttore. Dopo uno "scaling" opportuno e con alcune ipotesi semplificatrici, tale problema può essere modellizzato nel modo seguente:

$$\left\{ \begin{array}{ll} l^2 \Delta \psi = q - p + D & \text{in } \Omega \subset R^2 \\ - \operatorname{div}(\nabla p + p \nabla \psi) = R & \text{in } \Omega \\ - \operatorname{div}(\nabla q - q \nabla \psi) = R & \text{in } \Omega \\ + \text{condizioni al bordo.} \end{array} \right. \quad (1.1)$$

dove p e q sono densità di cariche positive e negative rispettivamente, ψ è il potenziale elettrico, R è il termine di generazione- ricombinazione, che dipende, in generale, in modo non lineare da p , q , e $\nabla \psi$, ed l (lunghezza di Debye) è in generale molto piccola. Una quantità fisica di importanza primaria è la densità di corrente. Essa è data da:

$$\underline{J}_p = -\nabla p - p \nabla \psi \quad (1.2)$$

per le cariche positive, e da

$$\underline{J}_q = \nabla q - q \nabla \psi \quad (1.3)$$

per le cariche negative. Il sistema (1.1) costituisce quello che viene chiamato il modello di van Roosbroeck [16]. Un primo problema che si presenta a livello della simulazione numerica è l'accoppiamento delle equazioni, di tipo non lineare. Per la linearizzazione vengono solitamente utilizzati procedimenti iterativi che sono varianti del metodo di

occupareremo nel presente lavoro. In particolare, vista la stretta parentela che lega fra loro la seconda e la terza equazione di (1.1), ci limiteremo ad affrontare solo la seconda equazione, relativa alle cariche positive, che riscriviamo qui per comodità con condizioni ai limiti di tipo abbastanza generale.

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Trovare } p \in H^1(\Omega) \text{ tale che} \\ -\text{div}(\underline{\nabla}p + p\underline{\nabla}\psi) = R \quad \text{in } \Omega \\ p = g \quad \text{su } \Gamma_0 \subset \partial\Omega \\ \frac{\partial p}{\partial n} + p\frac{\partial \psi}{\partial n} = 0 \quad \text{su } \Gamma_1 = \partial\Omega \setminus \Gamma_0 \end{array} \right. \quad (1.4)$$

Le difficoltà relative alla discretizzazione di tale equazione nascono dal fatto che, in molte applicazioni, $|\underline{\nabla}\psi|$ può essere piuttosto grosso in alcune zone di Ω . Quindi (1.4) diventa un'equazione di diffusione-trasporto a trasporto dominante, e schemi di discretizzazione classici non funzionano. Inoltre, poichè la corrente è la quantità fisica più rilevante del problema, è preferibile trovare metodi ad-hoc che conservino la corrente. Per problemi unidimensionali, uno schema molto efficiente è lo schema di Scharfetter-Gummel [15], in quanto fornisce una soluzione p molto accurata, ed inoltre conserva la corrente. Per il trattamento numerico di problemi bidimensionali, esistono in letteratura vari metodi che tentano di estendere lo schema di Scharfetter-Gummel. Ricordiamo ad esempio [12],[13], [2], [10], [5], [11]. Descriviamo qui alcuni schemi, recentemente introdotti ed analizzati in [3],[4],[7],[8], basati su metodi misti di exponential fitting. Questi metodi, applicati al caso unidimensionale, riproducono lo schema di Scharfetter-Gummel, ed inoltre hanno la proprietà di garantire una corrente continua.

Tratteremo discretizzazioni di (1.4) assumendo che ψ e g siano note. Inoltre, si suppone che ψ sia lineare a tratti. Usando il classico cambiamento di variabili dalla densità di cariche p alla variabile cosiddetta di Slotboom ρ

$$p = \rho e^{-\psi}, \quad (1.5)$$

$$\left\{ \begin{array}{ll} -\operatorname{div}(e^{-\psi}\nabla\rho) = R(\rho, q, \nabla\psi) & \text{in } \Omega \\ \rho = \chi := e^{\psi}g & \text{su } \Gamma_0 \\ \frac{\partial\rho}{\partial n} = 0 & \text{su } \Gamma_1 \end{array} \right. , \quad (1.6)$$

e la corrente è data da:

$$\underline{J}_p \equiv \underline{J} = -e^{-\psi}\nabla\rho . \quad (1.7)$$

Durante il procedimento iterativo di soluzione del sistema (1.1) l'equazione (1.6) viene solitamente linearizzata in modo da diventare:

$$\left\{ \begin{array}{ll} \text{Trovare } \rho \in H^1(\Omega) \text{ tale che} \\ -\operatorname{div}(e^{-\psi}\nabla\rho) + c\rho = f & \text{in } \Omega \\ \rho = \chi := e^{\psi}g & \text{su } \Gamma_0 \\ \frac{\partial\rho}{\partial n} = 0 & \text{su } \Gamma_1 \end{array} \right. \quad (1.8)$$

Nell'equazione (1.8) f è una funzione indipendente da ρ , e c è una funzione non negativa indipendente da ρ , che si può supporre costante a tratti. L'idea è di discretizzare (1.8) con elementi finiti misti, tornare alla variabile originaria p tramite un'opportuna versione discreta della trasformazione (1.5), ed infine risolvere in p .

Dal punto di vista algebrico, questa classe di schemi produce, nell'incognita ρ , una matrice simmetrica e definita positiva. Quando si applica l'inversa della trasformazione (1.5) per tornare all'incognita originaria p , la matrice corrispondente non è più, in generale, nè simmetrica, nè definita positiva. La sola proprietà che è conservata passando dall'incognita ρ all'incognita p è quella di essere una M-matrice. Inoltre, tale proprietà garantisce un principio di massimo discreto: in particolare, la soluzione è non negativa se i dati sono non negativi. Conseguentemente, non si introducono instabilità nella soluzione del sistema di van Roosbroeck completo. Nel caso $c = 0$, l'elemento di Raviart-Thomas [14] di grado più basso fornisce una matrice che è una M-matrice se la decomposizione è di tipo debolmente acuto (ogni angolo di ogni triangolo è $\leq \pi/2$), [3], [4]. Sfortunatamente questo non è più vero per $c > 0$. Per questo sono stati recentemente introdotti in [7],[8] due nuovi elementi che garantiscono la proprietà di M-matrice per ogni $c \geq 0$, sempre nell'ipotesi di una triangolazione di tipo debolmente acuto.

den errore ottimali sulla corrente, e dall'altro di garantire la continuit  della corrente stessa.

2. Discretizzazione

Ricordiamo la formulazione mista di (1.8). Sia T_h una decomposizione regolare di Ω in triangoli T [6], e sia E_h l'insieme dei lati l di T_h (si suppone che Ω sia un poligono). Assumiamo ora che $\underline{\tau}$ sia una funzione vettoriale regolare all'interno di ogni triangolo T , ed eventualmente discontinua alle interfacce. Scriviamo poi (1.7) come:

$$e^\psi \underline{J} + \underline{\nabla} \rho = 0 . \quad (2.1)$$

Moltiplicando (2.1) per $\underline{\tau}$, integrando su un triangolo T ed applicando la formula di Green si ottiene:

$$\int_T e^\psi \underline{J} \cdot \underline{\tau} dx dy - \int_T \operatorname{div} \underline{\tau} \rho dx dy + \int_{\partial T} \rho \underline{\tau} \cdot \underline{n} ds = 0 . \quad (2.2)$$

Sommando su tutti i triangoli T si ha:

$$\int_\Omega e^\psi \underline{J} \cdot \underline{\tau} dx dy - \sum_T \int_T \operatorname{div} \underline{\tau} \rho dx dy + \sum_T \int_{\partial T} \rho \underline{\tau} \cdot \underline{n} ds = 0 . \quad (2.3)$$

D'altra parte, sostituendo (1.7) in (1.8) si ottiene:

$$\operatorname{div} \underline{J} + c \rho = f . \quad (2.4)$$

Questo implica che:

$$\sum_T \int_T \operatorname{div} \underline{J} \phi dx dy + c \int_\Omega \rho \phi dx dy = \int_\Omega f \phi dx dy , \quad (2.5)$$

per ogni funzione ϕ regolare in ogni T . Infine, la continuit  della componente normale di \underline{J} agli interelementi implica:

$$\sum_T \int_{\partial T} \mu \underline{J} \cdot \underline{n} ds = 0 \quad (2.6)$$

contributi di ogni lato interno l alla (2.6) si annullano a vicenda). Se ora analizziamo (2.3), (2.5) e (2.6), possiamo individuare tre tipi di incognite e funzioni test:

- i) Funzioni vettoriali, regolari in ogni T : \underline{J} e $\underline{\tau}$;
- ii) Funzioni scalari, regolari in ogni T : ρ e ϕ ;
- iii) Funzioni scalari, regolari su ogni lato l : ρ e μ .

Per convenienza sar  opportuno chiamare diversamente la variabile ρ quando essa appare come variabile agli interelementi E_h ; definiamo dunque:

$$\lambda := \rho \quad \text{su } E_h . \quad (2.7)$$

Conseguentemente, abbiamo un problema variazionale in tre incognite, che riscriviamo in forma compatta:

$$\left\{ \begin{array}{l} \int_{\Omega} e^{\psi} \underline{J} \cdot \underline{\tau} dx dy - \sum_{T} \int_T \operatorname{div} \underline{\tau} \rho dx dy + \sum_{T} \int_{\partial T} \lambda \underline{\tau} \cdot \underline{n} ds = 0 \quad \forall \underline{\tau} \\ \sum_{T} \int_T \operatorname{div} \underline{J} \phi dx dy + c \int_{\Omega} \rho \phi dx dy = \int_{\Omega} f \phi dx dy \quad \forall \phi \\ \sum_{T} \int_{\partial T} \mu \underline{J} \cdot \underline{n} ds = 0 \quad \forall \mu \end{array} \right. \quad (2.8)$$

dove \underline{J} e λ sono legate a ρ mediante (1.7) e (2.7).

La nostra formulazione mista   basata su (2.8). Per descriverla dobbiamo scegliere tre spazi di dimensione finita per discretizzare \underline{J} , ρ , e λ . Definiamo, per ogni $T \in T_h$, tre insiemi polinomiali: $\Sigma(T)$ (spazio di vettori), $P(T)$ e $R(\partial T)$, (spazi di scalari). L'insieme delle restrizioni di $\mu \in R(\partial T)$ a un lato l   indicata con $R(l)$. Supporremo inoltre, ovviamente, che se $l = \partial T_1 \cap \partial T_2$, allora $R(l) = R(\partial T_1)|_l = R(\partial T_2)|_l$. Quindi costruiamo i nostri spazi di elementi finiti nel modo seguente:

$$V_h = \{ \underline{\tau} \in [L^2(\Omega)]^2 : \underline{\tau}|_T \in \Sigma(T), \forall T \in T_h \}, \quad (2.9)$$

$$W_h = \{ \phi \in L^2(\Omega) : \phi|_T \in P(T) \forall T \in T_h \}, \quad (2.10)$$

$$\Lambda_{h,\xi} = \{ \mu \in L^2(E_h) : \mu|_l \in R(l) \forall l \in E_h ; \int_l (\mu - \xi) ds = 0 \forall l \subset \Gamma_0 \}, \quad (2.11)$$

dove ξ   una qualunque funzione data di $L^2(\Gamma_0)$. Nella pratica si faranno due scelte per ξ : $\xi = \chi$ per imporre le condizioni di Dirichlet sulla soluzione discreta λ_h , e $\xi = 0$ per

$$\left\{ \begin{array}{l} \int_{\Omega} e^{\psi} \underline{J}_h \cdot \underline{\tau} dx dy - \sum_{\mathbb{T}} \int_{\mathbb{T}} \operatorname{div} \underline{\tau} \rho_h dx dy + \sum_{\mathbb{T}} \int_{\partial\mathbb{T}} \lambda_h \underline{\tau} \cdot \underline{n} ds = 0 \quad \underline{\tau} \in V_h, \\ \sum_{\mathbb{T}} \int_{\mathbb{T}} \operatorname{div} \underline{J}_h \phi dx dy + c \int_{\Omega} \rho_h \phi dx dy = \int_{\Omega} f \phi dx dy \quad \phi \in W_h, \\ \sum_{\mathbb{T}} \int_{\partial\mathbb{T}} \mu \underline{J}_h \cdot \underline{n} ds = 0 \quad \mu \in \Lambda_{h,0}. \end{array} \right. \quad (2.12)$$

Il problema (2.12) non avrà, in generale, una soluzione unica, a meno che le scelte di $\Sigma(\mathbb{T})$, $P(\mathbb{T})$ e $R(\partial\mathbb{T})$ soddisfino opportune condizioni di compatibilità. In particolare, come dimostrato in [7], le seguenti tre condizioni sono sufficienti a garantire l'esistenza di un'unica soluzione $(\underline{J}_h, \rho_h, \lambda_h)$ di (2.12):

- (H1) $\dim(\operatorname{div}(\Sigma(\mathbb{T}))) = \dim P(\mathbb{T})$;
- (H2) $\gamma_0(P(\mathbb{T})) \subseteq R(\partial\mathbb{T})$ ($\gamma_0 :=$ operatore di traccia su $\partial\mathbb{T}$);
- (H3) $\forall \phi \in P(\mathbb{T}), \forall \mu \in R(\partial\mathbb{T})$ t.c. $\|\nabla\phi\|_{0,\mathbb{T}} + \|\mu\|_{0,\partial\mathbb{T}} \neq 0 \quad \exists \underline{\tau} \in \Sigma(\mathbb{T})$:

$$\int_{\mathbb{T}} \underline{\tau} \cdot \nabla\phi dx + \int_{\partial\mathbb{T}} \mu \underline{\tau} \cdot \underline{n} ds \neq 0 \quad .$$

Per le stime dell'errore si rimanda, per esempio, a [7] e alla bibliografia ivi citata. Esempi di scelte di $\Sigma(\mathbb{T})$, $P(\mathbb{T})$ e $R(\partial\mathbb{T})$ che soddisfano (H1) – (H3) saranno date nel paragrafo successivo. Ci concentriamo ora sull'analisi degli aspetti algebrici del sistema (2.12).

Mantenendo le notazioni $\underline{J}_h, \rho_h, \lambda_h$ per i vettori dei valori nodali delle funzioni corrispondenti, il sistema lineare associato a (2.12) può essere scritto in forma matriciale come segue:

$$\begin{pmatrix} A & -B & C \\ -B^* & -cD & 0 \\ C^* & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \underline{J}_h \\ \rho_h \\ \lambda_h \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ -F \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (2.13)$$

La matrice in (2.13) non è definita positiva. Tuttavia A è diagonale a blocchi (ogni blocco corrisponde a un singolo elemento \mathbb{T}) e può essere facilmente invertita elemento per elemento. Quindi la variabile \underline{J}_h può essere eliminata per condensazione statica, dando luogo al nuovo sistema:

$$\begin{pmatrix} B^* A^{-1} B + cD & -B^* A^{-1} C \\ -C^* A^{-1} B & C^* A^{-1} C \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \rho_h \\ \lambda_h \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (2.14)$$

condensazione statica. Questo porta a un sistema finale, che agisce solo sull'incognita λ_h , della forma:

$$M \lambda_h = R , \quad (2.15)$$

dove M e R sono dati da:

$$M = C^* A^{-1} C - C^* A^{-1} B (B^* A^{-1} B + cD)^{-1} B^* A^{-1} C , \quad (2.16)$$

$$R = C^* A^{-1} B (B^* A^{-1} B + cD)^{-1} F , \quad (2.17)$$

e M è simmetrica e definita positiva.

Per tornare all'incognita originaria p ricordiamo che λ_h è un'approssimazione di ρ e possiamo dunque usare una versione discreta della trasformazione inversa di (1.5):

$$\lambda_h = (e^\psi)^I p_h . \quad (2.18)$$

In (2.18) $(e^\psi)^I$ è data lato per lato dalla media di e^ψ . La trasformazione (2.18) equivale a moltiplicare le colonne della matrice M per il valore di $(e^\psi)^I$ sul lato corrispondente. Il sistema finale nell'incognita p_h è della forma:

$$\widetilde{M} p_h = R . \quad (2.19)$$

La matrice \widetilde{M} non è più simmetrica, ma risulta essere una M-matrice se la matrice (2.16) lo è, e questo è vero se la triangolazione è di tipo debolmente acuto e se gli spazi $\Sigma(T)$, $P(T)$ e $R(\partial T)$ sono scelti in modo opportuno, come vedremo nel paragrafo seguente.

Nota . Come usuale nelle approssimazioni miste, il coefficiente e^ψ nella prima equazione di (2.12) può essere approssimato dalla funzione costante a tratti $e^{\bar{\psi}}$ definita in ogni triangolo T da:

$$e^{\bar{\psi}}|_T = \frac{\int_T e^\psi dx dy}{area(T)} . \quad (2.20)$$

equazione di continuità della corrente, ci sono due valide ragioni che suggeriscono la scelta di elementi di ordine basso: innanzitutto la scarsa regolarità del problema; secondariamente, la speranza di costruire una matrice finale M che sia una M-matrice. Presentiamo in questo paragrafo esempi di elementi finiti che verificano le ipotesi astratte (H1) – (H3), e sono indicati per l'applicazione a problemi di semiconduttori.

Esempio 1. La prima scelta è data dagli elementi finiti misti di Raviart-Thomas di ordine più basso:

$$\Sigma(T) = \text{span}\{(1, 0), (0, 1), (x, y)\} \quad (3.1)$$

$$P(T) = P_0(T) \quad (3.2)$$

$$R(\partial T) = P_0(\partial T) \quad (3.3)$$

dove, come solito, $P_0(T)$ indica lo spazio dei polinomi costanti in T , e $P_0(\partial T)$ lo spazio dei polinomi costanti su ogni lato di T .

Chiaramente questa scelta soddisfa le ipotesi (H1) – (H3), cosicchè il problema (2.12) ha una soluzione unica. Inoltre, si possono ottenere stime dell'errore ottimali per la corrente \underline{J} . Rimandiamo a [3], [4] per uno studio dettagliato di questo elemento in questo contesto. Sottolineiamo che la matrice (2.16) associata alla scelta (3.1)-(3.3) è una M-matrice soltanto nel caso $c = 0$. Per conservare tale proprietà anche per $c > 0$, sono stati introdotti due nuovi elementi misti.

Esempi 2-3. Gli spazi $\Sigma(T)$, $P(T)$, e $R(\partial T)$ sono costruiti come segue.

$$\Sigma(T) = \text{span}\{(1, 0), (0, 1), (\omega_1, \omega_2)\} \quad , \quad (3.4)$$

$$P(T) = P_0(T) \quad , \quad (3.5)$$

$$R(\partial T) = P_0(\partial T) \quad . \quad (3.6)$$

In (3.4), ω_1 e ω_2 sono polinomi in T da scegliersi opportunamente in modo da soddisfare le ipotesi (H1) – (H3), e, al tempo stesso, in modo da produrre una M-matrice per ogni valore non negativo di c .

$$\begin{cases} \int_l \underline{\sigma} \cdot \underline{n} \, ds & = 1 \\ \int_{\tilde{l}} \underline{\sigma} \cdot \underline{n} \, ds & = 0 \quad \tilde{l} \neq l \\ \int_T \omega_1 \, dxdy = \int_T \omega_2 \, dxdy & = 0 \end{cases} \quad (3.7)$$

Le condizioni (3.7) individuano una varietà di dimensione uno; $\underline{\sigma}$ può essere scelto arbitrariamente come un elemento di questa varietà. Per esempio, per fissare le idee, $\underline{\sigma}$ può essere scelto come l'elemento di norma minima, anche se altre scelte sono possibili. Si può verificare che le ipotesi (H1) – (H3) sono soddisfatte, e che inoltre la matrice (2.16) corrispondente a questo elemento è una M-matrice per ogni valore non negativo di c , se la triangolazione è di tipo debolmente acuto. Infine, facciamo notare che la scelta (3.4)-(3.7) produce una corrente \underline{J}_h debolmente continua. Infatti, poichè $\mu \in \Lambda_{h,0}$ è costante su ogni lato l , la terza equazione di (2.12) implica che il salto di $\underline{J}_h \cdot \underline{n}$ su l è a media nulla.

Seconda possibilità Sia $\underline{\sigma} := (\omega_1, \omega_2)$ con $\omega_1, \omega_2 \in P_2(T)$. Scelto un lato l di T , costruiamo $\underline{\sigma}$ tramite i seguenti gradi di libertà:

$$\begin{cases} \underline{\sigma} \cdot \underline{n}|_l & = 1 \\ \underline{\sigma} \cdot \underline{n}|_{\tilde{l}} & = 0 \quad \tilde{l} \neq l \\ \int_T \omega_1 \, dxdy = \int_T \omega_2 \, dxdy & = 0 \\ \int_T \underline{\sigma} \cdot \underline{rot} (\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3) \, dxdy & = 0 \quad \lambda_i \text{ } i\text{-esima coordinata baricentrica} \end{cases} \quad (3.8)$$

Come nel primo caso, (H1) – (H3) sono soddisfatte e la proprietà di M-matrice vale per ogni $c \geq 0$, se la decomposizione è di tipo debolmente acuto. Sottolineiamo che, in questo secondo caso, la corrente \underline{J}_h è continua su ogni lato. Infatti, poichè la componente normale di \underline{J}_h è costante su ogni lato, la terza equazione di (2.12) implica che $\underline{J}_h \cdot \underline{n}$ è continua su ogni lato. ■

Come previsto, gli schemi discreti nell'incognita p producono in modo naturale effetti di "upwind".

- [1] D.N.Arnold - F.Brezzi: Mixed and non-conforming finite element methods: implementation, post-processing and error estimates. *M²AN* **19**, 7-32, 1985.
- [2] R.E.Bank - D.J.Rose - W.Fichtner: Numerical methods for semiconductor device simulation. *IEEE Trans. El. Dev.*, **30** (9), 1031-1041, 1983.
- [3] F.Brezzi - L.D.Marini - P.Pietra: Two-dimensional exponential fitting and applications to drift-diffusion models. (In corso di stampa su *SIAM J.Numer.Anal.*)
- [4] F.Brezzi - L.D.Marini - P.Pietra: Numerical simulation of semiconductor devices. (In corso di stampa su *Comput.Meths.Appl.Mech. and Engr.*)
- [5] J.F.Burgler - R.E.Bank - W.Fichtner - R.Kent Smith: A New Discretization Scheme for the Semiconductor Current Continuity Equations. (In corso di stampa)
- [6] P.G.Ciarlet: *The Finite Element Method for Elliptic Problems*, North-Holland, Amsterdam, 1978.
- [7] L.D.Marini - P.Pietra: An abstract theory for mixed approximations of second order elliptic problems. (In corso di stampa su *Matem. Aplic. e Comput.*)
- [8] L.D.Marini - P.Pietra: New mixed finite element schemes for current continuity equations. (In corso di stampa su *COMPEL*).
- [9] P.A.Markowich: *The Stationary Semiconductor Device Equations*. Springer, 1986.
- [10] P.A.Markowich - M.Zlamal: Inverse-average-type finite element discretizations of self-adjoint second order elliptic problems. *Math. of Comp.*, **51**, 431-449, 1988.
- [11] J.J.H.Miller - S.Wang - C.H.Wu: A mixed finite element method for the stationary semiconductor continuity equations. *Engineering Computations*, **5**, 285-288, 1988.
- [12] M.S.Mock: *Analysis of Mathematical Models of Semiconductor Devices*, Dublin, Boole Press, 1983.
- [13] M.S.Mock: Analysis of a discretisation algorithm for stationary continuity equations in semiconductor device models II. *COMPEL* **3**, 137-149, 1984.
- [14] P.A.Raviart - J.M.Thomas: A mixed finite element method for second order elliptic problems. In *Mathematical aspects of the finite element method*. Lecture Notes in Math. **606**, 292-315, Springer, Berlin, 1977.

- [10] W.v.van Roosbroeck. Theory of flow of electrons and holes in germanium and other semiconductors. *Bell Syst. Tech. J.*, **29**, 560-607, 1950.