

UNIVERSITATEA DE STAT DIN MOLDOVA

Facultatea de Matematică și Informatică

Cu titlu de manuscris

C.Z.U. 519.6 (043.2)

SPRINCEAN GALINA

**MODELAREA MATEMATICĂ A PROCESELOR NELINIARE ÎN
DISPOZITIVELE SEMICONDUCTOARE**

112.03 – CIBERNETICĂ MATEMATICĂ ȘI CERCETĂRI OPERAȚIONALE

Rezumatul tezei de doctor în științe matematice

CHIȘINĂU, 2022

Teza a fost elaborată la Departamentul Matematică, Universitatea de Stat din Moldova.

Conducător științific:

PAȚIUC Vladimir dr. în șt. fiz.-mat., conf. univ.

Consultant științific:

CATARANCIUC Sergiu dr. hab. în șt. fiz.-mat., prof. univ.

Referenți oficiali:

ȘEREMET Victor dr. hab. în șt. fiz.-mat., prof. univ., UASM

SEICIUC Vladislav dr. în șt. fiz.-mat., conf. univ., UCCM

Componenta consiliului științific specializat:

LOZOVANU Dmitrii dr. hab. în șt. fiz.-mat., prof. univ.,
Institutul de Matematică și Informatică „Vladimir
Andrunachievici”,
Președinte al CȘS

BUZATU Radu dr. în șt. mat., lect. univ., USM,
Secretar științific al CȘS

BARSUC Alexandru dr. hab. în șt. fiz.-mat., prof. univ., USM

MORARU Vasile dr. în șt. fiz.-mat., prof. univ., UTM

SECRIERU Ion dr. în șt. fiz.-mat., conf. univ., CEITI

Susținerea va avea loc la **20.05.2022**, ora **15:00**

în ședința Consiliului Științific Specializat **D 112.03.-22-1**

din cadrul Universității de Stat din Moldova, mun. Chișinău, str. A.Mateevici, 60, MD – 2009,
Republica Moldova, **bloc IV, sala 222/4.**

Teza de doctor și rezumatul pot fi consultate la biblioteca Universității de Stat din Moldova (str. A. Mateevici, 60) și pe pagina web a ANACEC (www.cnaa.md).

Rezumatul a fost expediat la 11.04.2022

Secretarul științific al Consiliului științific specializat,

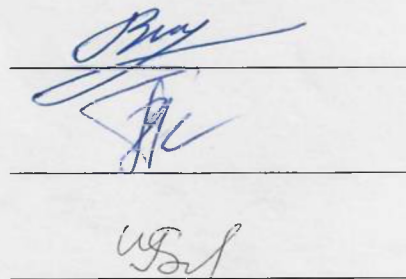
BUZATU Radu, dr. în șt. mat.

Conducător științific,

PAȚIUC Vladimir, dr. în șt. fiz.-mat.

Autor

SPRINCEAN Galina



CUPRINS

CUPRINS	3
REPERELE CONCEPTUALE ALE TEZEI	4
CONȚINUTUL TEZEI	7
CONCLUZII GENERALE ȘI RECOMANDĂRI.....	28
BIBLIOGRAFIE	32
LISTA LUCRĂRILOR PUBLICATE LA TEMA TEZEI	34
ADNOTARE	36

REPERELE CONCEPTUALE ALE TEZEI

Teza este consacrată studiului problemei modelării matematice a proceselor neliniare în dispozitivele semiconductoare (cazul diodei semiconductoare confecționată din siliciu), cu elaborarea algoritmilor numerici eficienți în scopul rezolvării ei.

Din multitudinea de tehnici oferite de știință la ora actuală, pentru modelarea matematică a proceselor neliniare, alegerea celor eficiente este una mai mult intuitivă decât algoritmică. Cazul fiecărei probleme neliniare este tratat în mod individual, deoarece, nu există algoritmi generali de modelare a ei. Modelarea matematică a proceselor neliniare în dispozitivul semiconductor este unul dintre aceste cazuri. Studii în direcția rezolvării problemei dispozitivului semiconductor au fost parțiale sau lipseau. Rezultatele obținute în cercetare sunt bazate pe teoriile existente cu elaborarea algoritmilor numerici ce soluționează problema cercetării, testarea lor și aplicarea ajustărilor necesare până la validarea lor, cu identificarea celor mai eficienți.

Actualitatea și importanța temei se datorează faptului că rezolvarea problemei dispozitivului semiconductor a presupus rezolvarea unui sistem de ecuații cu derivate parțiale, neliniare, având două tipuri de condiții la frontieră, care acționează pe porțiuni disjuncte ale ei. Studii în această direcție și anume, de rezolvare a problemelor neliniare mixte, cazul dispozitivului semiconductor, au fost parțiale sau lipseau. Importanța acestei cercetări, crește și din considerentul că nu doar au fost elaborați algoritmi numerici ce rezolvă problema cercetării dar au fost identificați cei mai eficienți, cu concluziile de rigoare.

Scopul lucrării. Scopul cercetării a fost elaborarea și argumentarea teoretică a unor algoritmi numerici eficienți pentru modelarea matematică a proceselor neliniare în dispozitivul semiconductor.

Obiectivele cercetării. Urmărind realizarea tuturor cerințelor față de elaborarea algoritmilor numerici ce modelează matematic procesele neliniare într-un dispozitiv semiconductor și a atingerii scopului cercetării, au fost formulate și realizate următoarele obiective:

1. *Stabilirea cadrului modelării numerice.* Etapa la care au fost definiți și analizați atât sistemul modelat, cât și scopurile urmărite: întrebările la care trebuia de dat un răspuns, variantele care trebuiau analizate, criteriile aplicate pentru compararea variantelor, modul de prezentare a rezultatelor, etc. În definirea sistemului analizat este bine să intervină toate detaliile cunoscute, care pot contribui la o mai bună înțelegere a funcționării acestuia, chiar dacă ulterior unele dintre ele vor fi considerate nerelevante pentru obiectivul urmărit.

2. *Elaborarea modelului conceptual, folosind notații matematice sau grafice adecvate.*

La această etapă a fost realizat un model unic, care a constituit punctul de pornire pentru modele numerice elaborate ulterior, cu modificarea unor elemente sau includerea unor elemente noi. Modelul trebuie să reflecte esența sistemului real, fără a include detalii inutile.

3. *Definirea experimentelor de modelare numerică.* Experimente în cadrul cărora au fost verificați și validați algoritmi numerici elaborați, în scopul obținerii rezultatelor necesare și pentru atingerea obiectivelor fixate.

4. *Colectarea și pregătirea datelor.* Date utilizate în cadrul experimentelor asupra modelelor numerice elaborate. Etapă importantă nu numai că fără aceste date nu este posibilă validarea modelului și obținerea rezultatelor dorite, dar și că anumite particularități ale lor se pot reflecta direct în modelul matematic al sistemului.

5. *Realizarea modelului matematic.* Obiectiv realizat ca rezultat al codificării modelului conceptual al sistemului sub formă de program MatLab. Alegerea a fost condiționată de numeroși factori, dintre care pot fi menționați disponibilitatea pachetelor de programe, experiența în utilizarea acestora, timpul necesar realizării modelului numeric și ușurința cu care pot fi efectuate modificări asupra acestuia.

6. *Verificarea și validarea algoritmilor numerici elaborați.* Obiectiv realizat în cadrul unor experimente, care să confirme analogia dintre comportarea modelului elaborat și cea a sistemului real. A fost necesar de a reexamina unele deciziile luate la etapele anterioare, în vederea detectării și corectării erorilor comise, atunci când acestea nu au condus la rezultatele dorite.

7. *Efectuarea experimentelor numerice generatoare de rezultate.* Rezultatele obținute în cadrul primelor experimente, de multe ori, au impus modificări ale modelului numeric sau ale modului în care trebuia continuată modelarea (adăugând noi experimente numerice sau renunțând la unele dintre cele planificate inițial).

8. *Analiza și interpretarea rezultatelor obținute.* Rezultatele analizei au fost destinate în scopul luării unor decizii. Pentru realizarea obiectivului propus a fost necesară prezentarea concluziilor într-o formă clară, sugestivă și convingătoare, folosind o exprimare accesibilă factorilor de decizie.

Ipoteza de cercetare a fost că problema modelării matematice a proceselor neliniare în dispozitivul semiconductor are soluție unică, fapt care și a fost dovedit în cadrul cercetării prin calculul numeric al ei cu o exactitate prestabilită. Tot în cadrul cercetării a fost determinată viteza și costul de calcul al soluției cu identificarea variantelor mai eficiente.

Sinteza metodologiei de cercetare. Pentru realizarea obiectivelor tezei au fost implementate următoarele modele teoretice și metode de analiză:

1. A fost aplicată teoria materialelor semiconductoare și cea a diodelor semiconductoare, pentru formularea matematică a problemei dispozitivului semiconductor.
2. A fost aplicată teoria schemelor în diferențe și cea a schemei lui Scharfetter-Gummel, pentru discretizarea ecuațiilor cu derivate parțiale, neliniare.
3. Au fost aplicate teoriile de liniarizare ale ecuațiilor cu utilizarea algoritmului Gummel și cea a metodei lui Newton.
4. Au fost utilizate teoriile metodelor iterative, semi-iterative și variaționale, pentru rezolvarea sistemelor algebrice liniare.
5. A fost utilizat pachetul de calcul MatLab, pentru implementarea algoritmilor ce modelează matematic procesele neliniare în dispozitivul semiconductor, pe un sistem de calcul cu următorii parametri: SO Windows 7 extinsă (pe 64 biți), procesor (2 nuclee cu viteză de 2,1 GHz, fiecare), RAM 4,1 GB, GPU pe 32 biți, 200Hz, memorie video de 1,8 GB.

Teza este scrisă în limba română și conține introducere, patru capitole, concluzii generale și recomandări, bibliografie din 113 titluri, 3 anexe, 126 pagini cu text de bază, 4 figuri, 16 tabele. Rezultatele obținute sunt publicate în 14 lucrări științifice.

Descrierea situației în domeniul de cercetare. În ultimii ani Sistemele Micro-Electro-Mecanice (SMEM) au înregistrat o evoluție impresionantă și au atins o importanță (utilitate) comercială semnificativă. Una dintre consecințe este relația sa strânsă cu tehnologia microelectronică stabilită pe bază de siliciu, care permite producerea dispozitivelor de înaltă performanță, dimensiuni mici și costuri reduse.

SMEM sunt fabricate printr-o varietate de tehnici ce utilizează o varietate de materiale. Cu toate acestea pentru SMEM pe bază de siliciu una dintre principalele tehnici este gravarea anizotropă umedă a substratului de siliciu cu soluție alcalină. Această tehnică este atractivă datorită costului redus, simplității implementării și producerii suprafețelor bine definite și lustruite. Procesul fizic și chimic implicat în coroziunea anizotropă încă nu este înțeles în totalitate deoarece geometria 3D a profilurilor gravate poate atinge o complexitate mare. Acest lucru face dificilă prezicerea rezultatelor dintr-un proces specific de coroziune și devine foarte importantă disponibilitatea unei simulări.

Simularea oferă un instrument cu caracter științific profund și exact, dând totodată posibilitatea studierii stărilor reale ale sistemelor fără alcătuirea lor fizică.

CONȚINUTUL TEZEI

În **Introducere** sunt prezentate actualitatea și importanța temei de cercetare, scopul și obiectivele tezei, noutatea științifică, importanța teoretică și valoarea aplicativă a rezultatelor obținute.

În **capitolul 1, Stadiul actual al cercetărilor din domeniul modelării matematice a proceselor neliniare în dispozitivele semiconductoare**, sunt expuse succint cele mai recente rezultate teoretice și experimentale din domeniul cercetării [1,7,14,15,16,17,18,19,20,21,22,25,26,27]. Tot în acest capitol este formulată matematic problema ce a fost examinată și obiectivele realizate pentru soluționarea ei.

Problema dispozitivului semiconductor este una dintre problemele la rezolvarea căreia poate fi aplicată doar analiza indirectă. Complexitatea modelelor matematice pentru dispozitivul semiconductor a impus crearea algoritmilor de modelare numerică ale acestora, verificarea și validarea lor prin testări și alegerea variantelor optime.

Modelarea numerică a dispozitivelor semiconductoare active, presupune prezicerea funcționării electrice a lor. Din multitudinea de tehnici oferite de știință la ora actuală pentru modelarea numerică a proceselor neliniare, care corespund modelului dispozitivelor semiconductoare, alegerea celor eficiente este mai mult intuitivă decât algoritmică. Cazul fiecărei probleme neliniare este tratat în mod individual deoarece nu există algoritmi generali de modelarea a ei.

Scopul cercetării a fost elaborarea și argumentarea teoretică a unor algoritmi eficienți pentru modelarea matematică a proceselor neliniare în dispozitivul semiconductor.

În **Capitolul 2, Modelarea matematică a funcționalității dispozitivului semiconductor prin potențialul electrostatic și cuazi-potențialele lui Fermi**, [2,4,5,6,18,20,21,23,28,31,32] a fost rezolvată problema dispozitivului semiconductor enunțată prin potențialul electrostatic și cuazi-potențialele lui Fermi. Problema dispozitivului semiconductor a presupus rezolvarea unui sistem de trei ecuații diferențiale neliniare: ecuația lui Poisson și ecuațiile continuității pentru electroni și goluri. În cadrul modelării dispozitivului semiconductor, expusă în cadrul acestui capitol, au fost folosite suplimentar soluțiile analitice pentru densități ale curenților de electroni și goluri și cele ale cuasi-potențialelor lui Fermi pentru electroni și goluri. Ca condiții la frontieră au servit condițiile lui Dirichlet și cele ale lui Neumann, care acționează pe porțiuni dizjuncte ale frontierei. Astfel, problema matematică a dispozitivului semiconductor pentru soluționarea căreia, în cadrul acestui capitol, au fost descriși 6 algoritmi numerici elaborați, cu implementarea acestora în forma softului corespunzător, care

poate fi folosit la modelarea reală a dispozitivelor semiconductoare, este următorul sistem de ecuații diferențiale neliniare:

Ecuația lui Poisson

$$-\nabla \cdot (\varepsilon \nabla \varphi) = q(p - n + N) \quad (2.1)$$

Ecuația continuității pentru electroni

$$-\nabla \cdot (J_n) = -q(RG_{SRH} + RG_{AUG}) \quad (2.2)$$

Ecuația continuității pentru goluri

$$\nabla \cdot (J_p) = -q(RG_{SRH} + RG_{AUG}) \quad (2.3)$$

Ecuația densității de curent pentru electroni

$$J_n = -qn\mu_n \nabla \varphi_n \quad (2.4)$$

Ecuația densității de curent pentru goluri

$$J_p = -qn\mu_p \nabla \varphi_p \quad (2.5)$$

Ecuația cuasi-potențialului lui Fermi pentru electroni

$$\varphi_n = \varphi - \varphi_T \ln\left(\frac{n}{n_i}\right) \quad (2.6)$$

Ecuația cuasi-potențialului lui Fermi pentru goluri

$$\varphi_p = \varphi - \varphi_T \ln\left(\frac{p}{n_i}\right) \quad (2.7)$$

Domeniul de definiție a problemei (2.1) – (2.3) cu soluțiile analitice (2.4) – (2.7) a fost notat prin $\Omega = (0 < x_1 < l_{x_1}, 0 < x_2 < l_{x_2})$ având frontiera $\Gamma = \Gamma_D \cup \Gamma_N$, unde Γ_D este porțiunea la care sunt conectați electrozii anod și catod (linia mai pronunțată din *Figura 2.1*), iar Γ_N , porțiunea rămasă a frontierei. Astfel întreg domeniul de definiție pentru variabilele sistemului fundamental este notat $\bar{\Omega} = \Omega \cup \Gamma$.

Condițiile la frontieră:

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

$$\varphi(\bar{x}) = V_a + \varphi_T \ln\left(\frac{N + \sqrt{N^2 + 4n_i^2}}{2n_i}\right), \quad n(\bar{x}) = \frac{N + \sqrt{N^2 + 4n_i^2}}{2}, \quad p(\bar{x}) = \frac{-N + \sqrt{N^2 + 4n_i^2}}{2}, \quad \bar{x} \in \Gamma_D. \quad (2.8)$$

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

$$\vec{n} \cdot \nabla \varphi = \frac{\partial \varphi}{\partial n} = 0; \quad \vec{n} \cdot J_n = 0; \quad \vec{n} \cdot J_p = 0, \quad \bar{x} \in \Gamma_N. \quad (2.9)$$

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 la vectorii densităților de curenți pentru electroni J_n și goluri J_p .

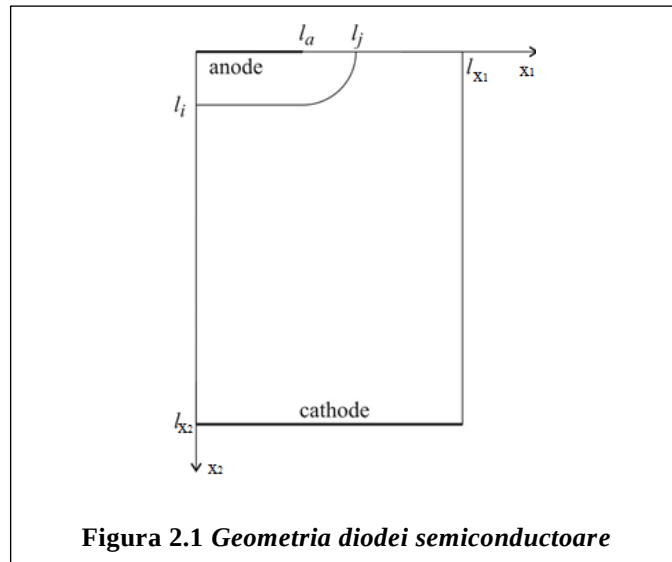


Figura 2.1 Geometria diodei semiconductoare

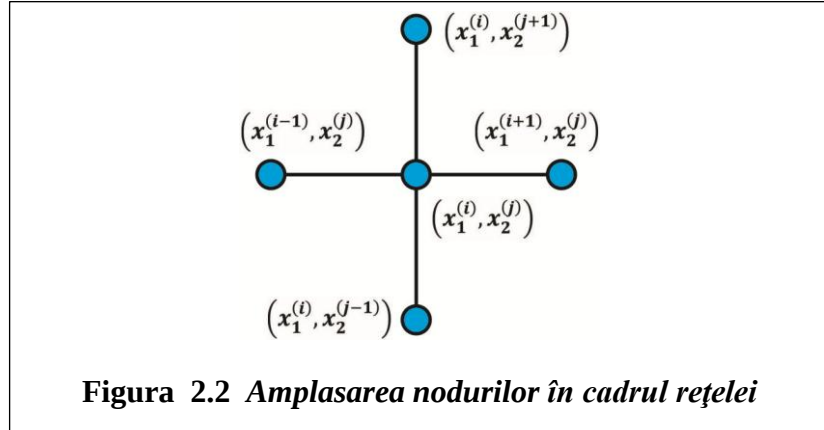
Etapele de implementare a unui algoritm numeric la soluționarea problemei dispozitivului semiconductor au fost: discretizarea ecuațiilor diferențiale neliniare pe domeniul de definiție a problemei, liniarizarea ecuațiilor sistemului algebric obținut și rezolvarea sistemului algebric liniar prin una dintre metodele iterative.

În cadrul acestui capitol, pentru cei 6 algoritmi numerici expuși, la etapa de discretizare au fost folosite schemele în diferențe, în cadrul liniarizării ecuațiilor sistemelor algebrice obținute a fost folosită ideea algoritmului lui Gummel și la etapa de rezolvare a sistemelor algebrice liniare au folosit 6 metode iterative, astfel obținându-se o diversitate de 6 algoritmi numerici pentru rezolvarea problemei dispozitivului semiconductor. Ca metode iterative de rezolvare a sistemelor algebrice liniare au fost folosite metoda Iterațiilor Simple, metoda lui Gauss-Seidel, metoda Super Relaxării, metoda Parametrilor Cebîșev pe două straturi, metoda Parametrilor Cebîșev pe trei straturi și metoda Gradientilor Conjugați. La finalul capitolului algoritmi numerici deșcriși au fost comparați pentru identificarea celui mai eficient. Mecanismul de comparare a algoritmilor numerici creați a conținut următorii parametri: 1) numărul de operații pentru calcularea unei noi aproximări a funcțiilor necunoscute la o iterație, 2) numărul de iterații interne, 3) numărul de iterații externe, 4) durata experimentului, 5) ordinul de convergență.

La prima etapă, conform algoritmului numeric de soluționare a problemei dispozitivului semiconductor, ecuațiile (2.1) – (2.3) cu condițiile la frontieră (2.8), (2.9) au fost discretizate folosind schemele cu diferențe finite.

Pe domeniul continuu de definiție a problemei (Figura 2.1) a fost introdusă o grilă cu pași h_{x_1} și h_{x_2} , pe orizontală și verticală, respectiv. Astfel a fost obținută rețeaua de noduri interne, notată cu $\Omega_h = \{(x_1^{(i)}, x_2^{(j)}) | i = 2, \dots, NN, j = 2, \dots, MM\}$, unde $x_1^{(i)} = (i - 1) \cdot$

h_{x_1} și $x_2^{(j)} = (j-1) * h_{x_2}$. 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 (nodurile interne și cele de pe frontieră), unde $\overline{\Omega_h} = \Omega_h \cup \Omega_D \cup \Omega_N$. Aici Ω_D este mulțimea nodurilor ce acoperă porțiunea de frontieră Γ_D , la care sunt conectați electrozii și pe care sunt definite condițiile lui Dirichlet, iar Ω_N mulțimea de noduri ce acoperă porțiunea de frontieră rămasă Γ_N și pe care sunt definite condițiile lui Neumann.



Astfel au fost obținute următoarele sisteme algebrice neliniare

$$2\varepsilon \left(\frac{1}{h_{x_1}^2} + \frac{1}{h_{x_2}^2} \right) \varphi_{ij} - \frac{\varepsilon}{h_{x_1}^2} (\varphi_{i+1,j} + \varphi_{i-1,j}) - \frac{\varepsilon}{h_{x_2}^2} (\varphi_{i,j+1} + \varphi_{i,j-1}) = q(p_{ij} - n_{ij} + N_{ij}) \quad (2.10)$$

$$\begin{aligned} \mu_n \left(\frac{n_{i-1/2,j} + n_{i+1/2,j}}{h_{x_1}^2} + \frac{n_{i,j-1/2} + n_{i,j+1/2}}{h_{x_2}^2} \right) \varphi_{n,ij} - \frac{\mu_n}{h_{x_1}^2} n_{i+1/2,j} \varphi_{n,i+1,j} - \frac{\mu_n}{h_{x_1}^2} n_{i-1/2,j} \varphi_{n,i-1,j} - \\ \frac{\mu_n}{h_{x_2}^2} n_{i,j+1/2} \varphi_{n,i,j+1} - \frac{\mu_n}{h_{x_2}^2} n_{i,j-1/2} \varphi_{n,i,j-1} = R_{SRH,ij} + R_{AUG,ij}, \end{aligned} \quad (2.11)$$

$$\begin{aligned} \mu_p \left(\frac{p_{i-1/2,j} + p_{i+1/2,j}}{h_{x_1}^2} + \frac{p_{i,j-1/2} + p_{i,j+1/2}}{h_{x_2}^2} \right) \varphi_{p,ij} - \frac{\mu_p}{h_{x_1}^2} p_{i+1/2,j} \varphi_{p,i+1,j} - \frac{\mu_p}{h_{x_1}^2} p_{i-1/2,j} \varphi_{p,i-1,j} - \\ \frac{\mu_p}{h_{x_2}^2} p_{i,j+1/2} \varphi_{p,i,j+1} - \frac{\mu_p}{h_{x_2}^2} p_{i,j-1/2} \varphi_{p,i,j-1} = -R_{SRH,ij} - R_{AUG,ij}, \end{aligned} \quad (2.12)$$

pe Ω_h cu $\varphi_{ij} = \varphi(x_1^{(i)}, x_2^{(j)})$, $n_{ij} = n(x_1^{(i)}, x_2^{(j)})$, $p_{ij} = p(x_1^{(i)}, x_2^{(j)})$, $N_{ij} = N(x_1^{(i)}, x_2^{(j)})$, $\varphi_{n,ij} = \varphi_n(x_1^{(i)}, x_2^{(j)})$, $\varphi_{p,ij} = \varphi_p(x_1^{(i)}, x_2^{(j)})$.

După discretizarea condițiilor la frontieră au fost obținute următoarele sisteme pentru condițiile lui Dirichlet (2.8), pe porțiunea de frontieră Γ_D

$$\begin{aligned} \varphi_{ij} = V_a + \varphi_T \ln \left(\frac{N_{ij} + \sqrt{N_{ij}^2 + 4n_i^2}}{2n_i} \right), \quad n_{ij} = \frac{N_{ij} + \sqrt{N_{ij}^2 + 4n_i^2}}{2}; \quad p_{ij} = \frac{-N_{ij} + \sqrt{N_{ij}^2 + 4n_i^2}}{2}; \quad \varphi_{n,ij} = \varphi_{ij} - \\ \varphi_T \ln \left(\frac{n_{ij}}{n_i} \right) \quad \varphi_{p,ij} = \varphi_{ij} + \varphi_T \ln \left(\frac{n_{ij}}{n_i} \right), \quad \text{pe } \Omega_D \end{aligned} \quad (2.13)$$

și pentru condițiile Neumann (2.9), care acționează pe porțiunea de frontieră Γ_N

$$\begin{cases} \varphi_{ij} = \varphi_{2j}, & i = 1, j = \overline{1, MM+1} \\ \varphi_{ij} = \varphi_{NNj}, & i = NN+1, j = \overline{1, MM+1} \\ \varphi_{ij} = \varphi_{i2}, & j = 1, i = \overline{1, NN+1}, x_1^{(i)} > l_a \end{cases} \quad (2.14)$$

$$\begin{cases} \varphi_{nij} = \varphi_{n2j}, & i = 1, j = \overline{1, MM+1} \\ \varphi_{nij} = \varphi_{nNNj}, & i = NN+1, j = \overline{1, MM+1} \\ \varphi_{nij} = \varphi_{ni2}, & j = 1, i = \overline{1, NN+1}, x_1^{(i)} > l_a \end{cases} \quad (2.15)$$

$$\begin{cases} \varphi_{pij} = \varphi_{p2j}, & i = 1, j = \overline{1, MM+1} \\ \varphi_{pij} = \varphi_{pNNj}, & i = NN+1, j = \overline{1, MM+1} \\ \varphi_{pij} = \varphi_{pi2}, & j = 1, i = \overline{1, NN+1}, x_1^{(i)} > l_a \end{cases} \quad (2.16)$$

Următoarele două etape, liniarizarea sistemelor algebrice obținute, folosind ideea algoritmului lui Gummel și rezolvarea sistemelor algebrice liniare prin una dintre metodele iterative au fost implementate conform schemelor care urmează.

În cazul aplicării Metodei Iterațiilor Simple

$$\varphi_{ij}^{(k+1)} = \frac{\left[\frac{\varepsilon}{h_{x1}^2} (\varphi_{i+1,j}^{(k)} + \varphi_{i-1,j}^{(k)}) + \frac{\varepsilon}{h_{x2}^2} (\varphi_{i,j+1}^{(k)} + \varphi_{i,j-1}^{(k)}) + q(p_{ij}^{(k)} - n_{ij}^{(k)} + N_{ij}^{(k)}) \right]}{\left[2\varepsilon \left(\frac{1}{h_{x1}^2} + \frac{1}{h_{x2}^2} \right) \right]},$$

cu $n_{ij}^{(k)} = n_i \exp\left(\frac{\varphi_{ij}^{(k)} - \varphi_{n,ij}^{(k)}}{\varphi_T}\right)$ și $p_{ij}^{(k)} = n_i \exp\left(\frac{\varphi_{p,ij}^{(k)} - \varphi_{ij}^{(k)}}{\varphi_T}\right)$, pe Ω_h (2.17)

$$\begin{aligned} \varphi_{n,ij}^{(k+1)} = & \left[\frac{\mu_n}{h_{x1}^2} n_{i+\frac{1}{2},j}^{(k)} \varphi_{n,i+1,j}^{(k)} + \frac{\mu_n}{h_{x1}^2} n_{i-\frac{1}{2},j}^{(k)} \varphi_{n,i-1,j}^{(k)} + \frac{\mu_n}{h_{x2}^2} n_{i,j+\frac{1}{2}}^{(k)} \varphi_{n,i,j+1}^{(k)} + \frac{\mu_n}{h_{x2}^2} n_{i,j-\frac{1}{2}}^{(k)} \varphi_{n,i,j-1}^{(k)} + \right. \\ & \left. R_{SRH,ij}^{(k)} + R_{AUG,ij}^{(k)} \right] / \left[\mu_n \left(\frac{n_{i-1/2,j}^{(k)} + n_{i+1/2,j}^{(k)}}{h_{x1}^2} + \frac{n_{i,j-1/2}^{(k)} + n_{i,j+1/2}^{(k)}}{h_{x2}^2} \right) \right], \text{ pe } \Omega_h \end{aligned} \quad (2.18)$$

$$\begin{aligned} \varphi_{p,ij}^{(k+1)} = & \left[\frac{\mu_p}{h_{x1}^2} p_{i+1/2,j}^{(k)} \varphi_{p,i+1,j}^{(k)} + \frac{\mu_p}{h_{x1}^2} p_{i-1/2,j}^{(k)} \varphi_{p,i-1,j}^{(k)} + \frac{\mu_p}{h_{x2}^2} p_{i,j+1/2}^{(k)} \varphi_{p,i,j+1}^{(k)} + \frac{\mu_p}{h_{x2}^2} p_{i,j-1/2}^{(k)} \varphi_{p,i,j-1}^{(k)} - \right. \\ & \left. R_{SRH,ij}^{(k)} - R_{AUG,ij}^{(k)} \right] / \left[\mu_p \left(\frac{p_{i+1/2,j}^{(k)} + p_{i-1/2,j}^{(k)}}{h_{x1}^2} + \frac{p_{i,j+1/2}^{(k)} + p_{i,j-1/2}^{(k)}}{h_{x2}^2} \right) \right], \text{ pe } \Omega_h \end{aligned} \quad (2.19)$$

cu $n_{ij}^{(k)}$, $p_{ij}^{(k)}$ calculate în nodurile interne ale rețelei și $n_{i+1/2,j}^{(k)}$, $n_{i-1/2,j}^{(k+1)}$, $n_{i,j+1/2}^{(k)}$, $n_{i,j-1/2}^{(k+1)}$, $p_{i+1/2,j}^{(k)}$, $p_{i-1/2,j}^{(k+1)}$, $p_{i,j+1/2}^{(k)}$, $p_{i,j-1/2}^{(k+1)}$ calculate în seminodurile interne ale rețelei.

În cazul aplicării Metodei Super Relaxării

$$\varphi_{ij}^{(k+1)} = (1 - \omega)\varphi_{ij}^{(k)} + \left[\frac{\omega}{h_{x_1}^2} \varphi_{i+1,j}^{(k)} + \frac{\omega}{h_{x_1}^2} \varphi_{i-1,j}^{(k+1)} + \frac{\omega}{h_{x_2}^2} \varphi_{i,j+1}^{(k)} + \frac{\omega}{h_{x_2}^2} \varphi_{i,j-1}^{(k+1)} + q \omega (p_{ij}^{(k)} - n_{ij}^{(k)} + N_{ij}^{(k)}) \right] / \left[\frac{2}{h_{x_1}^2} + \frac{2}{h_{x_2}^2} \right], \text{ pe } \Omega_h \quad (2.20)$$

$$\varphi_{n,ij}^{(k+1)} = (1 - \omega)\varphi_{n,ij}^{(k)} + \omega * \left[\frac{\mu_n}{h_{x_1}^2} n_{i+\frac{1}{2},j}^{(k)} \varphi_{n,i+1,j}^{(k)} + \frac{\mu_n}{h_{x_1}^2} n_{i-\frac{1}{2},j}^{(k+1)} \varphi_{n,i-1,j}^{(k+1)} + \frac{\mu_n}{h_{x_2}^2} n_{i,j+\frac{1}{2}}^{(k)} \varphi_{n,i,j+1}^{(k)} + \frac{\mu_n}{h_{x_2}^2} n_{i,j-\frac{1}{2}}^{(k+1)} \varphi_{n,i,j-1}^{(k+1)} + R_{SRH,ij}^{(k)} + R_{AUG,ij}^{(k)} \right] / \left[\mu_n \left(\frac{n_{i+1/2,j}^{(k)} + n_{i-1/2,j}^{(k+1)}}{h_{x_1}^2} + \frac{n_{i,j+1/2}^{(k)} + n_{i,j-1/2}^{(k+1)}}{h_{x_2}^2} \right) \right], \text{ pe } \Omega_h \quad (2.21)$$

$$\varphi_{p,ij}^{(k+1)} = (1 - \omega)\varphi_{p,ij}^{(k)} + \omega * \left[\frac{\mu_p}{h_{x_1}^2} p_{i+\frac{1}{2},j}^{(k)} \varphi_{p,i+1,j}^{(k)} + \frac{\mu_p}{h_{x_1}^2} p_{i-\frac{1}{2},j}^{(k+1)} \varphi_{p,i-1,j}^{(k+1)} + \frac{\mu_p}{h_{x_2}^2} p_{i,j+\frac{1}{2}}^{(k)} \varphi_{p,i,j+1}^{(k)} + \frac{\mu_p}{h_{x_2}^2} p_{i,j-\frac{1}{2}}^{(k+1)} \varphi_{p,i,j-1}^{(k+1)} - R_{SRH,ij}^{(k)} - R_{AUG,ij}^{(k)} \right] / \left[\mu_p \left(\frac{p_{i+1/2,j}^{(k)} + p_{i-1/2,j}^{(k+1)}}{h_{x_1}^2} + \frac{p_{i,j+1/2}^{(k)} + p_{i,j-1/2}^{(k+1)}}{h_{x_2}^2} \right) \right], \text{ pe } \Omega_h \quad (2.22)$$

cu $\omega = 1,64$.

Cazul aplicării Metodei Gauss-Seidel este un caz particular al Metodelor Relaxării cu $\omega = 1$.

În cazul Metodei Parametrilor Cebîșev pe două straturi

$$\varphi_{ij}^{(k+1)} = \left(1 - 2 \varepsilon \tau_{k+1} \left(\frac{1}{h_{x_1}^2} + \frac{1}{h_{x_2}^2} \right) \right) \varphi_{ij}^{(k)} + \tau_{k+1} \left(\frac{\varepsilon}{h_{x_1}^2} \varphi_{i+1,j}^{(k)} + \frac{\varepsilon}{h_{x_1}^2} \varphi_{i-1,j}^{(k)} + \frac{\varepsilon}{h_{x_2}^2} \varphi_{i,j+1}^{(k)} + \frac{\varepsilon}{h_{x_2}^2} \varphi_{i,j-1}^{(k)} + q(p_{ij}^{(k)} - n_{ij}^{(k)} + N_{ij}^{(k)}) \right), \text{ pe } \Omega_h \quad (2.23)$$

$$\begin{aligned} \varphi_{n,ij}^{(k+1)} = & \left(1 + \mu_n \tau_{k+1} \left(\frac{n_{i+1/2,j}^{(k)} + n_{i-1/2,j}^{(k)}}{h_{x_1}^2} + \frac{n_{i,j+1/2}^{(k)} + n_{i,j-1/2}^{(k)}}{h_{x_2}^2} \right) \right) \varphi_{n,ij}^{(k)} - \mu_n \tau_{k+1} \frac{n_{i+\frac{1}{2},j}^{(k)} \varphi_{n,i+1,j}^{(k)} + n_{i-\frac{1}{2},j}^{(k)} \varphi_{n,i-1,j}^{(k)}}{h_{x_1}^2} - \\ & \mu_n \tau_{k+1} \frac{n_{i,j+\frac{1}{2}}^{(k)} \varphi_{n,i,j+1}^{(k)} + n_{i,j-\frac{1}{2}}^{(k)} \varphi_{n,i,j-1}^{(k)}}{h_{x_2}^2} - \mu_n \tau_{k+1}, \text{ pe } \Omega_h \end{aligned} \quad (2.24)$$

$$\begin{aligned} \varphi_{p,ij}^{(k+1)} = & \left(1 - \mu_p \tau_{k+1} \left(\frac{p_{i+1/2,j}^{(k)} + p_{i-1/2,j}^{(k)}}{h_{x_1}^2} + \frac{p_{i,j+1/2}^{(k)} + p_{i,j-1/2}^{(k)}}{h_{x_2}^2} \right) \right) \varphi_{p,ij}^{(k)} + \mu_p \tau_{k+1} \frac{p_{i+1/2,j}^{(k)} \varphi_{p,i+1,j}^{(k)} + p_{i-1/2,j}^{(k)} \varphi_{p,i-1,j}^{(k)}}{h_{x_1}^2} + \\ & \mu_p \tau_{k+1} \frac{p_{i,j+\frac{1}{2}}^{(k)} \varphi_{p,i,j+1}^{(k)} + p_{i,j-\frac{1}{2}}^{(k)} \varphi_{p,i,j-1}^{(k)}}{h_{x_2}^2} - \tau_{k+1} \in \mathfrak{M}_{k_0}^{(optimal)}, \text{ pe } \Omega_h \end{aligned} \quad (2.25)$$

cu $\tau_{k+1} \in \mathfrak{M}_{k_0}^{(optimal)}$.

Parametrii metodei $\tau_{k+1} \in \mathfrak{M}_{k_0}^{(optimal)}$ au fost calculați și ordonați conform unui algoritm de optimizare, descris în **capitolul 2** al tezei.

În cazul Metodei Parametrilor Cebîșev pe trei straturi

$$\varphi_{ij}^{(k+1)} = \alpha_{k+1} \left(\left(1 - \tau_{k+1} \frac{2\varepsilon}{h_{x_1}^2} - \tau_{k+1} \frac{2\varepsilon}{h_{x_2}^2} \right) \varphi_{ij}^{(k)} + \tau_{k+1} \varepsilon \left(\frac{1}{h_{x_1}^2} \varphi_{i+1,j}^{(k)} + \frac{1}{h_{x_1}^2} \varphi_{i-1,j}^{(k)} + \frac{1}{h_{x_2}^2} \varphi_{i,j+1}^{(k)} + \frac{1}{h_{x_2}^2} \varphi_{i,j-1}^{(k)} \right) \right) + (1 - \alpha_{k+1}) \varphi_{ij}^{(k-1)} + \alpha_{k+1} \tau_{k+1} q \left(p_{ij}^{(k)} - n_{ij}^{(k)} + N_{ij}^{(k)} \right), \text{ pe } \Omega_h \quad (2.26)$$

$$\varphi_{n,ij}^{(k+1)} = \alpha_{k+1} \left(\left(1 + \frac{\mu_n \tau_{k+1}}{h_{x_1}^2} \left(n_{i+1/2,j}^{(k)} + n_{i-1/2,j}^{(k)} \right) + \frac{\mu_n \tau_{k+1}}{h_{x_2}^2} \left(n_{i,j+1/2}^{(k)} + n_{i,j-1/2}^{(k)} \right) \right) \varphi_{n,ij}^{(k)} - \frac{\mu_n \tau_{k+1}}{h_{x_1}^2} \left(n_{i+1/2,j}^{(k)} \varphi_{n,i+1,j}^{(k)} + n_{i-1/2,j}^{(k)} \varphi_{n,i-1,j}^{(k)} \right) - \frac{\mu_n \tau_{k+1}}{h_{x_2}^2} \left(n_{i,j+1/2}^{(k)} \varphi_{n,i,j+1}^{(k)} + n_{i,j-1/2}^{(k)} \varphi_{n,i,j-1}^{(k)} \right) \right) + (1 - \alpha_{k+1}) \varphi_{n,ij}^{(k-1)} + \alpha_{k+1} \tau_{k+1} \left(R_{SRH,ij}^{(k)} + R_{AUG,ij}^{(k)} \right), \text{ pe } \Omega_h \quad (2.27)$$

$$\varphi_{p,ij}^{(k+1)} = \alpha_{k+1} \left(\left(1 - \frac{\mu_p \tau_{k+1}}{h_{x_1}^2} \left(p_{i+1/2,j}^{(k)} + p_{i-1/2,j}^{(k)} \right) - \frac{\mu_p \tau_{k+1}}{h_{x_2}^2} \left(p_{i,j+1/2}^{(k)} + p_{i,j-1/2}^{(k)} \right) \right) \varphi_{p,ij}^{(k)} + \frac{\mu_p \tau_{k+1}}{h_{x_1}^2} \left(p_{i+1/2,j}^{(k)} \varphi_{p,i+1,j}^{(k)} + p_{i,j-1/2}^{(k)} \varphi_{p,i-1,j}^{(k)} \right) + \frac{\mu_p \tau_{k+1}}{h_{x_2}^2} \left(p_{i,j+1/2}^{(k)} \varphi_{p,i,j+1}^{(k)} + p_{i,j-1/2}^{(k)} \varphi_{p,i,j-1}^{(k)} \right) \right) + (1 - \alpha_{k+1}) \varphi_{p,ij}^{(k-1)} + \alpha_{k+1} \tau_{k+1} \left(R_{SRH,ij}^{(k)} + R_{AUG,ij}^{(k)} \right), \text{ pe } \Omega_h \quad (2.28)$$

cu τ_{k+1} , α_{k+1} parametrii metodei, valorile optime ale cărora au fost determinate experimental conform algoritmului descris în **capitolul 2** al tezei.

În cazul aplicării Metodei Gradientilor Conjugați pentru calcularea potențialului electrostatic la iterația curentă au fost realizați pașii descriși în continuare.

Calcularea valorilor inițiale pentru funcțiile necunoscute și pentru reziduu

$$r_{ij}^{(0)} = q \left(p_{ij}^{(0)} - n_{ij}^{(0)} + N_{ij}^{(0)} \right) - \left(\frac{2\varepsilon}{h_{x_1}^2} + \frac{2\varepsilon}{h_{x_2}^2} \right) \varphi_{ij}^{(0)} + \frac{2\varepsilon}{h_{x_1}^2} \varphi_{i+1,j}^{(0)} + \frac{2\varepsilon}{h_{x_2}^2} \varphi_{i,j+1}^{(0)} + \frac{2\varepsilon}{h_{x_1}^2} \varphi_{i-1,j}^{(0)} + \frac{2\varepsilon}{h_{x_2}^2} \varphi_{i,j-1}^{(0)}, \quad i = \overline{1, NN+1}, \quad j = \overline{1, MM+1}$$

Determinarea redirectionării inițiale

$$\omega_{ij}^{(0)} = r_{ij}^{(0)}, \quad i = \overline{1, NN+1}, \quad j = \overline{1, MM+1}$$

Determinarea valorii intermediare t_k

$$t^{(0)} = \sum_{i=1}^{NN+1} \sum_{j=1}^{MM+1} \left[r_{ij}^{(0)} \right]^2, \quad k = 0$$

Verificarea normei vectorului reziduului, dacă satisface condiția $\|r^{(k)}\| < \varepsilon$, procesul a fost stopat, în caz contrar s-a trecut la pasul următor cu mărirea indicelui iterației.

Calcularea componentelor pentru următorii vectori intermediari la iterația curentă ($k+1$)

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

$$\gamma^{(k+1)} = \sum_{i=0}^{NN+1} \sum_{j=0}^{MM+1} \omega_{ij}^{(k)} \cdot s_{ij}^{(k+1)}, \quad \alpha^{(k+1)} = \frac{t^{(k)}}{\gamma^{(k+1)}}, \text{ pe } \overline{\Omega_h}.$$

Calcularea componentele potențialului electrostatic φ la iterația $(k + 1)$

$$\varphi_{ij}^{(k+1)} = \varphi_{ij}^{(k)} + \alpha^{(k+1)} \omega_{ij}^{(k)}, \quad i = \overline{2, NN}, \quad \text{pe } \Omega_h$$

În nodurile de pe frontieră valorile potențialului electrostatic au fost approximate conform sistemului (2.13), (2.14).

Calcularea componentele vectorului reziduu la iterația $(k + 1)$

$$r_{ij}^{(k+1)} = r_{ij}^{(k)} - \alpha^{(k+1)} s_{ij}^{(k+1)}, \text{ pe } \overline{\Omega_h}$$

Calcularea valorilor intermediare

$$t^{(k+1)} = \sum_{i=1}^{NN+1} \sum_{j=1}^{MM+1} \left[r_{ij}^{(k+1)} \right]^2, \quad \beta^{(k+1)} = \frac{t^{(k+1)}}{t^{(k)}},$$

Calcularea redirectionării la iterația curentă

$$\omega_{ij}^{(k+1)} = r_{ij}^{(k+1)} + \beta^{(k+1)} \omega_{ij}^{(k)}, \quad \text{pe } \overline{\Omega_h}.$$

Revenirea la verificarea normei reziduului pentru potențialul electrostatic.

În cazul aplicării metodei Gradientilor Conjugați pentru calcularea cvasi-potențialului lui Fermi pentru electroni la iterația curentă au fost realizați pașii

$$r_{n,ij}^{(0)} = -q(R_{SRH,ij} + R_{AUG,ij}) + q\mu_n \left(\frac{n_{i+1,j}^{(o)} + n_{i-1,j}^{(o)}}{h_{x_1}^2} + \frac{n_{i,j+1}^{(o)} + n_{i,j-1}^{(o)}}{h_{x_2}^2} \right) \varphi_{n,ij}^{(o)} - q\mu_n \frac{n_{i+1,j}^{(o)}}{h_{x_1}^2} \varphi_{n,i+1,j}^{(o)} -$$

$$q\mu_n \frac{n_{i,j+1}^{(o)}}{h_{x_2}^2} \varphi_{n,i,j+1}^{(o)} - q\mu_n \frac{n_{i-1,j}^{(o)}}{h_{x_1}^2} \varphi_{n,i-1,j}^{(o)} - q\mu_n \frac{n_{i,j-1}^{(o)}}{h_{x_2}^2} \varphi_{n,i,j-1}^{(o)}, \quad \text{pe } \overline{\Omega_h},$$

Determinarea redirectionării inițiale

$$\omega_{n,ij}^{(0)} = r_{n,ij}^{(0)}, \quad \text{pe } \overline{\Omega_h},$$

Determinarea valorii intermediare

$$t_n^{(0)} = \sum_{i=1}^{NN+1} \sum_{j=1}^{MM+1} \left[r_{n,ij}^{(0)} \right]^2$$

Verificarea normei vectorului reziduului, dacă satisface condiția $\|r_n^{(k)}\| < \varepsilon$ procesul a fost stopat, în caz contrar s-a trecut la pasul următor cu mărirea indicelui iterației $(k = k + 1)$.

Calcularea componentelor pentru următorii vectori intermediari la iterația curentă $(k + 1)$

$$s_{n,ij}^{(k)} = -q\mu_n \left(\frac{n_{i+1,j}^{(k)} + n_{i-1,j}^{(k)}}{h_{x_1}^2} + \frac{n_{i,j+1}^{(k)} + n_{i,j-1}^{(k)}}{h_{x_2}^2} \right) \omega_{n,ij}^{(k)} + q\mu_n \frac{n_{i+1,j}^{(k)}}{h_{x_1}^2} \omega_{n,i+1,j}^{(o)} + q\mu_n \frac{n_{i,j+1}^{(k)}}{h_{x_2}^2} \varphi_{n,i,j+1}^{(k)} +$$

$$q\mu_n \frac{n_{i-1,j}^{(k)}}{h_{x_1}^2} \varphi_{n,i-1,j}^{(k)} + q\mu_n \frac{n_{i,j-1}^{(k)}}{h_{x_2}^2} \varphi_{n,i,j-1}^{(k)}, \quad \text{pe } \overline{\Omega_h}$$

Calcularea valorilor intermediare la iterația (k+1)

$$\gamma_{n,ij}^{(k+1)} = \sum_{i=1}^{NN+1} \sum_{j=1}^{MM+1} \omega_{n,ij}^{(k)} \cdot s_{n,ij}^{(k)}, \quad \alpha^{(k)} = \frac{t^{(k)}}{\gamma^{(k+1)}}$$

Calcularea componentelor cvasi-potențialului lui Fermi pentru electroni (φ_n) la iterația curentă ($k + 1$)

$$\varphi_{n,ij}^{(k+1)} = \varphi_{n,ij}^{(k)} + \alpha^{(k)} \omega_{ij}^{(k)}, \quad \text{pe } \overline{\Omega_h}$$

Aproximarea valorilor cvasi-potențialului lui Fermi φ_n în nodurile de pe frontieră conform sistemului (2.13), (2.15).

Calcularea componentelor vectorului reziduu la iterația curentă ($k + 1$)

$$r_{n,ij}^{(k+1)} = r_{n,ij}^{(k+1)} - \alpha^{(k)} s_{n,ij}^{(k)}, \quad \text{pe } \overline{\Omega_h}.$$

Calcularea valorilor intermediare

$$t_n^{(k+1)} = \sum_{i=1}^{NN+1} \sum_{j=1}^{MM+1} [r_{n,ij}^{(k+1)}]^2, \quad \beta_n^{(k+1)} = \frac{t_n^{(k+1)}}{t_n^{(k)}}$$

Calcularea componentelor vectorului de redirecționare la iterația curentă ($k + 1$)

$$\omega_{n,ij}^{(k+1)} = r_{n,ij}^{(k+1)} + \beta_n^{(k+1)} \omega_{n,ij}^{(k)}.$$

Revenirea la verificarea normei reziduului pentru cuasi-potențialul lui Fermi, cazul electronilor.

În cazul aplicării Metodei Gradientilor Conjugați pentru calcularea cvasi-potențialului lui Fermi pentru goluri, la iterația curentă, au fost realizați pașii care urmează.

Calcularea valorii inițiale pentru reziduu

$$r_{p,ij}^{(0)} = -q(R_{SRH,ij} + R_{AUG,ij}) - q\mu_p \left(\frac{p_{i+1,j}^{(o)} + p_{i-1,j}^{(o)}}{h_{x_1}^2} + \frac{p_{i,j+1}^{(o)} + p_{i,j-1}^{(o)}}{h_{x_2}^2} \right) \varphi_{p,ij}^{(o)} + q\mu_p \frac{p_{i+1,j}^{(o)}}{h_{x_1}^2} \varphi_{p,i+1,j}^{(o)} +$$

$$q\mu_p \frac{p_{i,j+1}^{(o)}}{h_{x_2}^2} \varphi_{p,i,j+1}^{(o)} + q\mu_p \frac{p_{i-1,j}^{(o)}}{h_{x_1}^2} \varphi_{p,i-1,j}^{(o)} + q\mu_p \frac{p_{i,j-1}^{(o)}}{h_{x_2}^2} \varphi_{p,i,j-1}^{(o)}, \text{ pe } \overline{\Omega_h}$$

Determinarea redirecționării inițiale

$$\omega_{p,ij}^{(0)} = r_{p,ij}^{(0)}, \text{ pe } \overline{\Omega_h}$$

Determinarea valorii intermediare

$$t_p^{(0)} = \sum_{i=1}^{NN+1} \sum_{j=1}^{MM+1} [r_{p,ij}^{(0)}]^2$$

Verificarea normei vectorului reziduu, dacă satisface condiția $\|r_p^{(k)}\| < \varepsilon$ procesul a fost stopat, în caz contrar s-a trecut la pasul următor, cu mărirea indicelui iterației ($k = k + 1$).

Calcularea componentelor pentru următorii vectori intermediari, la iterația curentă ($k + 1$)

$$s_{p,ij}^{(k)} = q\mu_p \left(\frac{p_{i+1,j}^{(k)} + p_{i-1,j}^{(k)}}{h_{x_1}^2} + \frac{p_{i,j+1}^{(k)} + p_{i,j-1}^{(k)}}{h_{x_2}^2} \right) \omega_{p,ij}^{(k)} - q\mu_p \frac{p_{i+1,j}^{(k)}}{h_{x_1}^2} \omega_{p,i+1,j}^{(o)} - q\mu_p \frac{p_{i,j+1}^{(k)}}{h_{x_2}^2} \varphi_{p,i,j+1}^{(k)} - q\mu_p \frac{p_{i-1,j}^{(k)}}{h_{x_1}^2} \varphi_{p,i-1,j}^{(k)} - q\mu_p \frac{p_{i,j-1}^{(k)}}{h_{x_2}^2} \varphi_{p,i,j-1}^{(k)}, \quad \text{pe } \overline{\Omega_h}$$

Calcularea valorilor intermediare

$$\gamma_{p,ij}^{(k+1)} = \sum_{i=1}^{NN+1} \sum_{j=1}^{MM+1} \omega_{p,ij}^{(k)} \cdot s_{p,ij}^{(k)}, \quad \alpha_p^{(k)} = \frac{t_p^{(k)}}{\gamma_p^{(k+1)}},$$

Calcularea componentelor cvasi-potențialului lui Fermi pentru goluri (φ_p) la iterația ($k + 1$)

$$\varphi_{p,ij}^{(k+1)} = \varphi_{p,ij}^{(k)} + \alpha_p^{(k)} \omega_{ij}^{(k)}, \text{ pe } \overline{\Omega_h}$$

Aproximarea valorile cvasi-potențialului lui Fermi pentru goluri $\varphi_p^{(k+1)}$ în nodurile de pe frontieră conform sistemului (2.13), (2.16) la iterația curentă ($k + 1$).

Calcularea componentelor vectorului reziduu la iterația curentă ($k + 1$)

$$r_{p,ij}^{(k+1)} = r_{p,ij}^{(k+1)} - \alpha_p^{(k)} s_{p,ij}^{(k)}, \text{ pe } \overline{\Omega_h}$$

Calcularea valorilor intermediare

$$t_p^{(k+1)} = \sum_{i=1}^{NN+1} \sum_{j=1}^{MM+1} [r_{p,ij}^{(k+1)}]^2, \quad \beta_p^{(k+1)} = \frac{t_p^{(k+1)}}{t_p^{(k)}},$$

Calcularea componentelor noii redirectionări pentru φ_p

$$\omega_{p,ij}^{(k+1)} = r_{p,ij}^{(k+1)} + \beta_p^{(k+1)} \omega_{p,ij}^{(k)}, \text{ pe } \overline{\Omega_h}$$

Revenirea la verificarea normei reziduuului pentru cuasi-potențialului lui Fermi, cazul golurilor.

Valorile curente ale potențialului electrostatic și cele ale cvasi-potențialelor lui Fermi pentru electroni și goluri au fost calculate în cadrul a trei cicluri interne. Noile valori ale funcțiilor necunoscute au fost verificate în cadrul unui ciclu comul celor trei necunoscute, la ieșirea din care tensiunea aplicată la anod din exterior a fost mărită iterativ, cu pași mici. Acest proces iterativ a durat cât timp calculele numerice au rămas stabile. Pentru a avea posibilitatea de a compara și identifica cel mai eficient algoritm numeric elaborat ce modelează matematic procesele neliniare în dispozitivul semiconductor procesul a durat până la aplicarea din exterior

anodului tensiunea de $V_a = 0,2 \text{ A}$. Eficiența algoritmilor a fost determinată în baza mecanismului descris mai sus și rezultatele expuse în următorul tabel. Valorile soluției au fost calculate cu o exactitate de ordinul 10^{-10} , pe o rețea de noduri (16×32).

Tabel 2.1: Numărul mediu de iterații. Cazul tripletului de necunoscute $\{\varphi, \varphi_n$ și $\varphi_p\}$ pentru fiecare metodă iterativă aplicată în capitolul 2.

Algoritmul numeric cu aplicarea	Nr. de operații necesare	Nr de iterații interne, k_0	Nr de iterații externe	Durata experimentului (min)	Ordinul de convergență (teorie)
MIS	36nn	11681889	2455	2460	$O(h^{-2})$
MGS	60nn	1234075	187	780	$O(h^{-2})$
MSR	45nn	42964	42	20	$O(h^{-1})$
MPC2	36nn+19	4313	20	188	$O(h^{-3})$
MPC3	78nn	144001	21	40	$O(h^{-1})$
MGC	$6nn^2+27nn$	151591874	20	8640	$O(h^{-2})$

Aici, $nn \times nn$ este ordinul matricei sistemului algebric, k_0 numărul de iterații interne, h pasul rețelei utilizată pentru discretizarea ecuațiilor modelului matematic.

În **Capitolul 3, Modelarea matematică a proceselor neliniare în dispozitivul semiconductor prin potențialul electrostatic și concentrații ale sarcinilor**, [9,10,11,12,13,24] a fost enunțată problema dispozitivului semiconductor prin potențialul electrostatic și concentrații ale electronilor și golurilor. Problema dispozitivului semiconductor a presupus rezolvarea aceluiași sistem de ecuații diferențiale (2.1) – (2.3). În cadrul acestui capitol au fost descriși algoritmi numerici de modelare matematică a dispozitivului semiconductor cu utilizarea soluțiilor analitice ale densităților de curent pentru electroni și goluri, și ale concentrațiilor de sarcini pentru electroni și goluri. Ca condiții la frontieră au servit condițiile lui Dirichlet și cele ale lui Neumann (2.8), (2.9), care acționează pe porțiuni disjuncte ale frontierei. Astfel problema dispozitivului semiconductor, pentru soluționarea căreia în cadrul acestui capitol au fost descriși 6 algoritmi numerici, este sistemul din ecuațiile (2.1) – (2.3) cu soluții analitice ale acestora, enumerate în continuare

Ecuația densității de curent pentru electroni

$$J_n = J_{n \text{ drift}} + J_{n \text{ difuzie}} = q n \mu_n \bar{E} + q D_n \nabla n \quad (3.1)$$

Ecuația densității de curent pentru goluri

$$J_p = J_{p \text{ drift}} + J_{p \text{ difuzie}} = q p \mu_p \bar{E} - q D_p \nabla p \quad (3.2)$$

Ecuații ale concentrațiilor purtătorilor de sarcină pentru electroni și goluri, respectiv

$$n = n_i \rho_n \exp\left(\frac{\varphi}{\varphi_T}\right) \quad (3.3)$$

$$p = n_i \rho_p \exp\left(-\frac{\varphi}{\varphi_T}\right) \quad (3.4)$$

La elaborarea celor 6 algoritmi numerici de modelare matematică a proceselor neliniare în dispozitivul semiconductor cu implementarea lor în forma softului corespunzător, care poate fi folosit la modelarea reală a dispozitivelor semiconductoare, descriși în cadrul acestui capitol, la etapa de discretizare au fost folosite schemele cu diferențe și schema lui Scharfetter-Gummel. Pentru liniarizarea ecuațiilor din cadrul sistemelor algebrice obținute a fost folosită ideea algoritmului lui Gummel. La etapa de rezolvare a sistemelor algebrice liniare au fost folosite mai multe metode iterative, în cazul unor algoritmi fiind utilizate combinat câte 2 metode iterative. Ca metode iterative de rezolvare a sistemelor algebrice liniare au fost folosite Metoda Iterațiilor Simple, Metoda lui Gauss-Seidel, Metoda Super Relaxării, Metoda Parametrilor Cebîșev, Metoda Gradientilor Conjugați și cea a Gradientilor Bi-Conjugați. În finalul capitolului algoritmi numerici realizați au fost comparați și identificat cel mai eficient. Pentru comparare a fost folosit același sistem de parametri: 1) *numărul de operații pentru calcularea unei noi aproximări a funcțiilor necunoscute la o iterație*, 2) *numărul de iterații interne*, 3) *numărul de iterații externe*, 4) *durata experimentului*, 5) *ordinul de convergență*.

După etapa discretizării, ecuațiile (2.1) – (2.3), utilizate fiind schemele în diferențe, au trecut în următoarele sisteme algebrice neliniare

$$2\varepsilon \left(\frac{1}{h_{x_1}^2} + \frac{1}{h_{x_2}^2} \right) \varphi_{ij} - \frac{\varepsilon}{h_{x_1}^2} (\varphi_{i+1,j} + \varphi_{i-1,j}) - \frac{\varepsilon}{h_{x_2}^2} (\varphi_{i,j+1} + \varphi_{i,j-1}) = q(p_{ij} - n_{ij} + N_{ij}) \text{ pe } \Omega_h \quad (3.5)$$

$$- \left(\frac{J_{n,i+1/2,j} - J_{n,i-1/2,j}}{h_{x_1}^2} + \frac{J_{n,i,j+1/2} - J_{n,i,j-1/2}}{h_{x_2}^2} \right) = -q \left(\frac{n_{ij} p_{ij} - n_i^2}{\tau_p(n_{ij} + n_i) + \tau_n(p_{ij} + n_i)} + (n_{ij} * p_{i,j} - n_i^2)(C_n * n_{i,j} + C_p * p_{i,j}) \right), \text{ pe } \Omega_h \quad (3.6)$$

$$\left(\frac{J_{p,i+1/2,j} - J_{p,i-1/2,j}}{h_{x_1}^2} + \frac{J_{p,i,j+1/2} - J_{p,i,j-1/2}}{h_{x_2}^2} \right) = -q \left(\frac{n_{ij} p_{ij} - n_i^2}{\tau_p(n_{ij} + n_i) + \tau_n(p_{ij} + n_i)} + (n_{ij} p_{ij} - n_i^2)(C_n n_{ij} + C_p p_{ij}) \right), \text{ pe } \Omega_h \quad (3.7)$$

Pentru sistemele (3.6), (3.7) în continuarea procesului de discretizare a fost folosită schema lui Scharfetter-Gummel. Pașii realizării schemei, pentru sistemul (3.6), sunt descriși în continuare.

Folosind ecuația densității pentru electroni

$$J_n = q \mu_n E n + q D_n \nabla n, \text{ unde } E = -\nabla \varphi,$$

densitatea curenților de electroni (J_n) în seminodul $(x_1^{(i-1/2)}, x_2^{(j)})$ a fost discretizată conform relației

$$J_{n,i-1/2,j} = q E_{i-1/2,j} n_{i-1/2,j} + q \mu_n \varphi_T \frac{\partial n_{i-1/2,j}}{\partial \varphi} \cdot \frac{\partial \varphi}{\partial x_1}$$

$$J_{n,i-1/2,j} = q E_{i-1/2,j} n_{i-1/2,j} + q \mu_n \varphi_T \frac{\partial n_{i-1/2,j}}{\partial \varphi} \cdot (-E_{i-1/2,j})$$

Notând $D_{i-1/2,j} = q \mu_n \varphi_T E_{i-1/2,j}$ și $V_{i-1/2,j} = q E_{i-1/2,j}$ expresia de mai sus, rescrisă, a luat forma

$$J_{n,i-1/2,j} = V_{i-1/2,j} n_{i-1/2,j} - D_{i-1/2,j} \frac{\partial n_{i-1/2,j}}{\partial \varphi} \quad (3.8)$$

Relația (3.8) a fost înmulțită la $e^{-\frac{V(\varphi-\varphi_{ij})}{D}}$

$$J_{n,i-1/2,j} \cdot e^{-\frac{V(\varphi-\varphi_{ij})}{D}} = \left(V_{i-1/2,j} n_{i-1/2,j} - D_{i-1/2,j} \frac{\partial n_{i-1/2,j}}{\partial \varphi} \right) \cdot e^{-\frac{V(\varphi-\varphi_{ij})}{D}}$$

rescrisă a luat forma

$$J_{n,i-1/2,j} \cdot e^{-\frac{V(\varphi-\varphi_{ij})}{D}} = -D \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(n e^{-\frac{V(\varphi-\varphi_{ij})}{D}} \right)$$

Ambele părți ale relației de mai sus au fost integrate, având ca variabilă de integrare potențialul electrostatic (φ)

$$\int_{\varphi_{i-1,j}}^{\varphi_{ij}} J_{n,i-1/2,j} \cdot e^{-\frac{V(\varphi-\varphi_{ij})}{D}} d\varphi = \int_{\varphi_{i-1,j}}^{\varphi_{ij}} -D \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(n \cdot e^{-\frac{V(\varphi-\varphi_{ij})}{D}} \right) d\varphi$$

Astfel, aplicând un șir de transformări au fost obținute relațiile

$$J_{n,i-1/2,j} \cdot \left(-\frac{D}{V} \right) \cdot e^{-\frac{V(\varphi-\varphi_{ij})}{D}} \Big|_{\varphi_{i-1,j}}^{\varphi_{ij}} = -D \cdot \left(n \cdot e^{-\frac{V(\varphi-\varphi_{ij})}{D}} \right) \Big|_{\varphi_{i-1,j}}^{\varphi_{ij}}$$

$$J_{n,i-1/2,j} \cdot \left(-\frac{D}{V} \right) \cdot \left(1 - e^{-\frac{V(\varphi_{i-1,j}-\varphi_{ij})}{D}} \right) = -D \cdot \left(n_{i,j} - n_{i-1,j} \cdot e^{-\frac{V(\varphi_{i-1,j}-\varphi_{ij})}{D}} \right)$$

$$J_{n,i-1/2,j} = V \cdot \left(n_{i,j} - n_{i-1,j} \cdot e^{-\frac{V(\varphi_{i-1,j}-\varphi_{ij})}{D}} \right) / \left(1 - e^{-\frac{V(\varphi_{i-1,j}-\varphi_{ij})}{D}} \right)$$

$$J_{n,i-1/2,j} = V \cdot \left(n_{i,j} \cdot \frac{1}{1 - e^{-\frac{V(\varphi_{i-1,j}-\varphi_{ij})}{D}}} - n_{i-1,j} \cdot \frac{e^{-\frac{V(\varphi_{i-1,j}-\varphi_{ij})}{D}}}{1 - e^{-\frac{V(\varphi_{i-1,j}-\varphi_{ij})}{D}}} \right)$$

$$J_{n,i-1/2,j} = q E_{i-1/2,j} \cdot \left(n_{i,j} \cdot \frac{1}{1 - e^{-\frac{q \mu_n E_{i-1/2,j} (\varphi_{i-1,j}-\varphi_{ij})}{q \mu_n \varphi_T E_{i-1/2,j}}}} - n_{i-1,j} \cdot \frac{e^{-\frac{q \mu_n E_{i-1/2,j} (\varphi_{i-1,j}-\varphi_{ij})}{q \mu_n \varphi_T E_{i-1/2,j}}}}{1 - e^{-\frac{q \mu_n E_{i-1/2,j} (\varphi_{i-1,j}-\varphi_{ij})}{q \mu_n \varphi_T E_{i-1/2,j}}}} \right)$$

$$J_{n,i-1/2,j} = q \cdot \left(-\frac{\varphi_{i,j} - \varphi_{i-1,j}}{h_{x_1}} \right) \cdot \frac{\mu_n \varphi_T}{\mu_n \varphi_T} \cdot \left(n_{i,j} \cdot \frac{1}{1 - e^{\frac{\varphi_{i,j} - \varphi_{i-1,j}}{\mu_n \varphi_T}}} - n_{i-1,j} \cdot \frac{e^{\frac{\varphi_{i,j} - \varphi_{i-1,j}}{\varphi_T}}}{1 - e^{\frac{\varphi_{i,j} - \varphi_{i-1,j}}{\varphi_T}}} \right)$$

$$J_{n,i-1/2,j} = -q \cdot \frac{\mu_n \varphi_T}{h_{x_1}} \cdot \left(n_{i,j} \cdot \frac{\frac{\varphi_{i,j} - \varphi_{i-1,j}}{\varphi_T}}{1 - e^{\frac{\varphi_{i,j} - \varphi_{i-1,j}}{\varphi_T}}} - n_{i-1,j} \cdot \frac{\frac{\varphi_{i-1,j} - \varphi_{i,j}}{\varphi_T}}{1 - e^{\frac{\varphi_{i-1,j} - \varphi_{i,j}}{\varphi_T}}} \right)$$

Utilizând funcția lui Bernoulli $B(x) = \frac{x}{e^x - 1}$ în expresia de mai sus, s-a trecut la următoarea expresie pentru densitatea electronilor (J_n) în seminodul $(x_1^{(i-1/2)}, x_2^{(j)})$, exprimată prin nodurile întregi ale rețelei

$$J_{n,i-1/2,j} = q \cdot \frac{\mu_n V_T}{h_{x_1}} \cdot B\left(\frac{\varphi_{i-1,j} - \varphi_{i,j}}{\varphi_T}\right) \cdot n_{i-1,j} - q \cdot \frac{\mu_n V_T}{h_{x_1}} \cdot B\left(\frac{\varphi_{i,j} - \varphi_{i-1,j}}{\varphi_T}\right) \cdot n_{i,j} \quad (3.9)$$

Pași similari au fost realizați pentru a discretiza densitatea curenților de electroni J_n în seminodul $(x_1^{(i+1/2)}, x_2^{(j)})$. Astfel, a fost obținută expresia

$$J_{n,i+1/2,j} = q \cdot \frac{\mu_n V_T}{h_{x_1}} \cdot B\left(\frac{\varphi_{i,j} - \varphi_{i+1,j}}{\varphi_T}\right) \cdot n_{i,j} - q \cdot \frac{\mu_n V_T}{h_{x_1}} \cdot B\left(\frac{\varphi_{i+1,j} - \varphi_{i,j}}{\varphi_T}\right) \cdot n_{i+1,j} \quad (3.10)$$

La discretizarea densității curenților pentru electroni J_n în seminodul $(x_1^{(i)}, x_2^{(j-1/2)})$, cu aplicarea schemei lui Scharfetter-Gummel, a fost obținută următoarea expresie

$$J_{n,i,j-1/2} = q \cdot \frac{\mu_n V_T}{h_{x_2}} \cdot B\left(\frac{\varphi_{i,j-1} - \varphi_{i,j}}{\varphi_T}\right) \cdot n_{i,j-1} - q \cdot \frac{\mu_n V_T}{h_{x_2}} \cdot B\left(\frac{\varphi_{i,j} - \varphi_{i,j-1}}{\varphi_T}\right) \cdot n_{i,j} \quad (3.11)$$

Iar pentru discretizarea densității curenților pentru electroni J_n în seminodul $(x_1^{(i)}, x_2^{(j+1/2)})$, cu aplicarea schemei lui Scharfetter-Gummel, a fost obținută expresia

$$J_{n,i,j+1/2} = q \cdot \frac{\mu_n V_T}{h_{x_2}} \cdot B\left(\frac{\varphi_{i,j} - \varphi_{i,j+1}}{\varphi_T}\right) \cdot n_{i,j} - q \cdot \frac{\mu_n V_T}{h_{x_2}} \cdot B\left(\frac{\varphi_{i,j+1} - \varphi_{i,j}}{\varphi_T}\right) \cdot n_{i,j+1} \quad (3.12)$$

Aplicând schema lui Scharfetter-Gummel în toate nodurile interne pentru sistemul (3.6) a fost realizată trecerea la următorul sistem algebric pentru determinarea concentrației de electroni

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

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

$$\frac{\mu_n V_T B\left(\frac{\varphi_{i,j-1} - \varphi_{i,j}}{\varphi_T}\right)}{h_{x_2}^2} * n_{i,j-1} = - \left(\frac{n_{i,j} p_{i,j} - n_i^2}{\tau_p(n_{i,j} + n_i) + \tau_n(p_{i,j} + n_i)} + (n_{i,j} * p_{i,j} - n_i^2) * (C_n n_{i,j} + C_p p_{i,j}) \right),$$

pe Ω_h (3.13)

Realizând schema lui Scharfetter-Gummel în toate nodurile interne pentru sistemul (3.7) a fost obținut următorul sistem algebric pentru determinarea concentrației de goluri

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\mu_p \varphi_{\tau B} \left(\frac{\varphi_{i+1,j} - \varphi_{ij}}{\varphi_T} \right) + \mu_p \varphi_{\tau B} \left(\frac{\varphi_{i-1,j} - \varphi_{ij}}{\varphi_T} \right)}{h_{x_1}^2} + \frac{\mu_n \varphi_{\tau B} \left(\frac{\varphi_{i,j+1} - \varphi_{ij}}{\varphi_T} \right) + \mu_n \varphi_{\tau B} \left(\frac{\varphi_{i,j-1} - \varphi_{ij}}{\varphi_T} \right)}{h_{x_2}^2} \right) * p_{i,j} - \\ & \frac{\mu_p \varphi_{\tau B} \left(\frac{\varphi_{ij} - \varphi_{i+1,j}}{\varphi_T} \right)}{h_{x_1}^2} * p_{i+1,j} - \frac{\mu_p \varphi_{\tau B} \left(\frac{\varphi_{ij} - \varphi_{i-1,j}}{\varphi_T} \right)}{h_{x_1}^2} * p_{i-1,j} - \frac{\mu_p \varphi_{\tau B} \left(\frac{\varphi_{ij} - \varphi_{i,j+1}}{\varphi_T} \right)}{h_{x_2}^2} * p_{i,j+1} - \\ & \frac{\mu_p \varphi_{\tau B} \left(\frac{\varphi_{ij} - \varphi_{i,j-1}}{\varphi_T} \right)}{h_{x_2}^2} * p_{i,j-1} = -q * \left(\frac{n_{ij} p_{ij} - n_i^2}{\tau_p (n_{ij} + n_i) + \tau_n (p_{ij} + n_i)} + (n_{ij} p_{ij} - n_i^2) * (C_n n_{ij} + C_p p_{ij}) \right), \end{aligned}$$

pe Ω_h (3.14)

După discretizarea condițiilor la frontieră au fost obținute următoarele sisteme algebrice.

Ca alternativă pentru condițiile lui Dirichlet (2.8), pe porțiunea de frontieră Γ_D

$$\begin{aligned} \varphi_{ij} &= V_a + \varphi_T \ln \left(\frac{N_{ij} + \sqrt{N_{ij}^2 + 4n_i^2}}{2n_i} \right), \quad n_{ij} = \frac{N_{ij} + \sqrt{N_{ij}^2 + 4n_i^2}}{2}; \quad p_{ij} = \frac{-N_{ij} + \sqrt{N_{ij}^2 + 4n_i^2}}{2}; \\ \varphi_{n,ij} &= \varphi_{ij} - \varphi_T \ln \left(\frac{n_{ij}}{n_i} \right) \quad \varphi_{p,ij} = \varphi_{ij} + \varphi_T \ln \left(\frac{n_{ij}}{n_i} \right), \quad \text{pe } \Omega_D \end{aligned} \quad (3.15)$$

și pentru condițiile Neumann (2.9), care acționează pe porțiunea de frontieră Γ_N

$$\begin{cases} \varphi_{ij} = \varphi_{2j}, \quad i = 1, \quad j = \overline{1, MM+1} \\ \varphi_{ij} = \varphi_{NNj}, \quad i = NN+1, \quad j = \overline{1, MM+1} \\ \varphi_{ij} = \varphi_{i2}, \quad j = 1, \quad i = \overline{1, NN+1}, \quad x_1^{(i)} > l_a \end{cases} \quad (3.16)$$

$$\begin{cases} n_{ij} = n_{2j}, \quad i = 1, \quad j = \overline{1, MM+1} \\ n_{ij} = n_{NNj}, \quad i = NN+1, \quad j = \overline{1, MM+1} \\ n_{ij} = n_{i2}, \quad j = 1, \quad i = \overline{1, NN+1}, \quad x_1^{(i)} > l_a \end{cases} \quad (3.17)$$

$$\begin{cases} p_{ij} = p_{2j}, \quad i = 1, \quad j = \overline{1, MM+1} \\ p_{ij} = p_{NNj}, \quad i = NN+1, \quad j = \overline{1, MM+1} \\ p_{ij} = p_{i2}, \quad j = 1, \quad i = \overline{1, NN+1}, \quad x_1^{(i)} > l_a \end{cases} \quad (3.18)$$

La realizarea următoarei etape a algoritmului numeric, cea de liniarizare a sistemelor algebrice, a fost folosită ideea algoritmului Gummel, proces descris în **capitolul 2** al tezei.

Pentru rezolvarea sistemelor algebrice liniare au fost realizate schemele iterative a următoarelor metode sau combinații a două metode: metoda Iterațiilor Simple, metoda Gauss Seidel, metoda Super Relaxării, combinația metodelor Parametrilor Cebîșev pe două straturi și cea a Gradientilor Bi-Conjugați, combinația metodelor Parametrilor Cebîșev pe trei straturi și cea

a Gradientilor Bi-Conjugați, combinația metodelor Gradientilor Conjugați și cea a Gradientilor Bi-Conjugați. Algoritmii au fost descriși detaliat în **capitolul 3** al tezei.

Valorile curente ale potențialului electrostatic și cele ale cvasi-potențialelor lui Fermi pentru electroni și goluri au fost calculate în cadrul a trei cicluri interne. Noile valori ale funcțiilor necunoscute au fost verificate în cadrul unui ciclu comul celor trei necunoscute, la ieșirea din care tensiunea aplicată la anod din exterior a fost mărită iterativ, cu pași mici. Acest proces iterativ a durat cât timp calculele numerice au rămas stabile. Pentru a avea posibilitatea de a compara și identifica cel mai eficient algoritm numeric de rezolvare a problemei modelării matematice a dispozitivului semiconductor procesul a durat până la aplicarea din exterior anodului tensiunea de $V_a = 0,2 A$. Eficiența algoritmilor a fost determinată în baza parametrilor enumerați mai sus și rezultatele expuse în următorul tabel. Valorile soluției au fost calculate cu o exactitate de ordinul 10^{-10} , pe o rețea de noduri (16×32) .

Tabel 3.1: Numărul mediu de iterații. Cazul tripletului de necunoscute $\{\phi, n$ și $p\}$ pentru fiecare metodă iterativă aplicată în capitolul 3.

Algoritmul numeric cu aplicarea	Nr. de operații necesare	Nr de iterații interne, k_0	Nr de iterații externe	Durata experimentului i (min)	Ordinul de convergență (teorie)
MIS	$36nn$	855420	516	480	$O(h^{-2})$
MGs	$60nn$	81923	64	30	$O(h^{-2})$
MSR	$45nn$	8860	158	5	$O(h^{-1})$
MGC+MGBiC	$10nn^2+53nn-14$	210	33	3	$O(h^{-2})$
MPC2+MGBiC	$4nn^2+46nn-7$	71783	67	540	$O(h^{-3})$
MPC3+MGBIC	$4nn^2+74nn-7$	515525	271	1260	$O(h^{-2})$

Aici, $nn \times nn$ este ordinul matricei sistemului algebric, k_0 numărul de iterații interne, h pasul rețelei utilizată pentru discretizarea ecuațiilor modelului matematic.

În **capitolul 4, Modelarea matematică a proceselor neliniare în dispozitivele semiconductoare cu aplicarea metodei Newton**, [3,38,39] a fost enunțată problema dispozitivului semiconductor prin potențialul electrostatic și concentrații ale electronilor și golurilor. Problema dispozitivului semiconductor a presupus rezolvarea aceluiași sistem de ecuații diferențiale (2.1) – (2.3). În cadrul acestui capitol au fos descrise modelele care au folosit ca soluții analitice ecuațiile densităților de curent pentru electroni și goluri și ecuațiile concentrațiilor de sarcini pentru electroni și goluri (3.1) – (3.4). Ca condiții la frontieră au servit condițiile lui Dirchlet și cele ale lui Neumann, care acționează pe porțiuni dizjuncte ale frontierei (2.8), (2.9). La prima etapă, conform algoritmului numeric de soluționare a problemei

dispozitivului semiconductor, ecuațiile (2.1) – (2.3) au fost discretizate cu utilizarea schemelor în diferențe și a schemei lui Scharfetter-Gummel, astfel fiind realizată trecerea la sistemele algebrice (3.5), (3.13), (3.14).

În cadrul acestui capitol, spre deosebire de capitolele anterioare, etapa de liniarizare a ecuațiilor sistemelor algebrice a fost realizată cu utilizarea metodei Newton. Rezolvarea sistemelor algebrice liniare obținute au fost realizată cu utilizarea unei metode iterative. Astfel, în cadrul **capitolului 4** a fost descris un singur algoritm de modelare matematică a proceselor neliniare într-un dispozitiv semiconductor cu implementarea lui în forma softului corespunzător, care poate fi folosit la modelarea reală a dispozitivelor semiconductoare.

La liniarizarea ecuațiilor cu utilizarea metodei Newton au fost parcurse etapele descrise în continuare.

În cazul sistemului (3.5) au fost folosite următoarele notații:

$\overline{\varphi^{(ex)}}(x_1, x_2)$ fiind soluția exactă a sistemului (3.5), $\overline{\varphi^{(old)}}(x_1, x_2)$ valoarea calculată la iterația precedentă, $\overline{\varphi^{(new)}}(x_1, x_2)$ valoarea calculată la iterația curentă, $\overline{\varphi^{(in)}}(x_1, x_2)$ valoarea inițială a potențialului electrostatic și $\bar{\delta}_\varphi(x_1, x_2)$ eroarea.

Astfel, au fost obținute relațiile pentru iterațiile inițială și cea curentă, respectiv:

$$\overline{\varphi^{(ex)}}(x_1, x_2) = \overline{\varphi^{(in)}}(x_1, x_2) + \bar{\delta}_\varphi(x_1, x_2), \quad (4.1)$$

$$\overline{\varphi^{(new)}}(x_1, x_2) = \overline{\varphi^{(old)}}(x_1, x_2) + \bar{\delta}_\varphi(x_1, x_2) \quad (4.2)$$

Liniarizarea ecuațiilor sistemului algebric, folosind ideea algoritmului metodei Newton, a fost realizată prin substituirea relației (4.2) în sistemul (3.5). Iar pentru separarea sistemului (3.5) de celelalte două sisteme algebrice (3.13) și (3.14) în calitate de necunoscută a rămas funcția $\overline{\varphi^{(new)}}(x_1, x_2)$ exprimată prin relația (4.2), celelalte două funcții au fost luate ca constante cu valori calculate la iterația precedentă $\overline{n^{(old)}}(x_1, x_2)$, $\overline{p^{(old)}}(x_1, x_2)$.

A fost obținut următorul sistemul algebric liniar în necunoscuta $\bar{\delta}_\varphi(x_1, x_2)$

$$\begin{aligned} & \left(\frac{2\varepsilon}{h_{x_1}^2} + \frac{2\varepsilon}{h_{x_2}^2} \right) \delta_{\varphi,i,j} - \frac{\varepsilon}{h_{x_1}^2} \delta_{\varphi,i+1,j} - \frac{\varepsilon}{h_{x_1}^2} \delta_{\varphi,i-1,j} - \frac{\varepsilon}{h_{x_2}^2} \delta_{\varphi,i,j+1} - \frac{\varepsilon}{h_{x_2}^2} \delta_{\varphi,i,j-1} = - \left(\frac{2\varepsilon}{h_{x_1}^2} + \right. \\ & \left. \frac{2\varepsilon}{h_{x_2}^2} \right) \varphi_{i,j}^{(old)} + \frac{\varepsilon}{h_{x_1}^2} \varphi_{i+1,j}^{(old)} + \frac{\varepsilon}{h_{x_1}^2} \varphi_{i-1,j}^{(old)} + \frac{\varepsilon}{h_{x_2}^2} \varphi_{i,j+1}^{(old)} + \frac{\varepsilon}{h_{x_2}^2} \varphi_{i,j-1}^{(old)} + q(p_{i,j}^{(old)} - n_{i,j}^{(old)} + N_{i,j}), \end{aligned} \quad (4.3)$$

pe Ω_h

Rezolvând sistemul algebric (4.3) prin una dintre metodele numerice iterative, în cadrul unui ciclu intern inferior, a fost calculată valoarea $\bar{\delta}_\varphi(x_1, x_2)$ cu o eroare prestabilită. În baza noii valori $\bar{\delta}_\varphi(x_1, x_2)$ a fost recalculată noua aproximare pentru potențialul electrostatic

$$\overline{\varphi^{(new)}}(x_1, x_2) = \overline{\varphi^{(old)}}(x_1, x_2) + \bar{\delta}_\varphi(x_1, x_2) \quad (4.4)$$

Noua valoare a potențialului electrostatic ($\varphi^{(new)}$) a fost recalculată iterativ până la atingerea exactității prestabilite.

La ieșirea din ciclul intern (4.3), (4.4) au fost calculate valorile curente ale potențialului electrostatic ($\varphi^{(new)}$) în nodurile de pe frontieră, conform relațiilor (3.15), (3.16).

În cazul sistemului algebric neliniar (3.13) au fost folosite următoarele notații: $\overline{n^{(ex)}}(x_1, x_2)$ fiind soluția exactă a sistemului (3.13), $\overline{n^{(old)}}(x_1, x_2)$ soluția sistemului calculată la iterația precedentă, $\overline{n^{(new)}}(x_1, x_2)$ soluția sistemului calculată la iterația curentă, $\overline{n^{(in)}}(x_1, x_2)$ valoarea inițială a concentrației de electroni, iar $\bar{\delta}_n(x_1, x_2)$ eroarea.

Astfel, au fost obținute relațiile pentru iterațiile inițială și cea curentă, respectiv

$$\overline{n^{(ex)}}(x_1, x_2) = \overline{n^{(in)}}(x_1, x_2) + \bar{\delta}_n(x_1, x_2), \quad (4.5)$$

$$\overline{n^{(new)}}(x_1, x_2) = \overline{n^{(old)}}(x_1, x_2) + \bar{\delta}_n(x_1, x_2), \quad (4.6)$$

Liniarizarea sistemului algebric (3.13) folosind ideia algoritmului metodei Newton a fost realizată prin substituirea relației (4.6) în sistemul (3.13). Iar pentru separarea sistemului (3.13) de celelalte două sisteme algebrice (3.5), (3.14) a fost aplicat algoritmul lui Gummel, în calitate de necunoscută rămânând concentrația de electroni $\overline{n^{(new)}}(x_1, x_2)$ exprimată prin relația (4.6), celelalte două potențialul electrostatic și concentrația de goluri au fost luate ca constante cu valori calculate la iterația precedentă $\overline{\varphi^{(old)}}(x_1, x_2)$ și $\overline{p^{(old)}}(x_1, x_2)$, respectiv.

S-a obținut sistemul algebric liniar în necunoscuta $\bar{\delta}_n(x_1, x_2)$

$$\begin{aligned} & \left(\frac{B \left(\frac{\varphi_{i,j}^{(old)} - \varphi_{i+1,j}^{(old)}}{V_T} \right) + B \left(\frac{\varphi_{i,j}^{(old)} - \varphi_{i-1,j}^{(old)}}{V_T} \right)}{h_{x_1}^2} + \frac{B \left(\frac{\varphi_{i,j}^{(old)} - \varphi_{i,j+1}^{(old)}}{V_T} \right) + B \left(\frac{\varphi_{i,j}^{(old)} - \varphi_{i,j-1}^{(old)}}{V_T} \right)}{h_{x_2}^2} \right) \delta_{n,i,j} - \\ & \frac{B \left(\frac{\varphi_{i+1,j}^{(old)} - \varphi_{i,j}^{(old)}}{V_T} \right)}{h_{x_1}^2} \delta_{n,i+1,j} - \frac{B \left(\frac{\varphi_{i-1,j}^{(old)} - \varphi_{i,j}^{(old)}}{V_T} \right)}{h_{x_1}^2} \delta_{n,i-1,j} - \frac{B \left(\frac{\varphi_{i,j+1}^{(old)} - \varphi_{i,j}^{(old)}}{V_T} \right)}{h_{x_2}^2} \delta_{n,i,j+1} - \\ & \frac{B \left(\frac{\varphi_{i,j-1}^{(old)} - \varphi_{i,j}^{(old)}}{V_T} \right)}{h_{x_2}^2} \delta_{n,i,j-1} = \\ & - \left(\frac{B \left(\frac{\varphi_{i,j}^{(old)} - \varphi_{i+1,j}^{(old)}}{V_T} \right) + B \left(\frac{\varphi_{i,j}^{(old)} - \varphi_{i-1,j}^{(old)}}{V_T} \right)}{h_{x_1}^2} + \frac{B \left(\frac{\varphi_{i,j}^{(old)} - \varphi_{i,j+1}^{(old)}}{V_T} \right) + B \left(\frac{\varphi_{i,j}^{(old)} - \varphi_{i,j-1}^{(old)}}{V_T} \right)}{h_{x_2}^2} \right) \cdot n_{i,j}^{(old)} + \end{aligned}$$

$$\frac{B\left(\frac{\varphi_{i+1,j}^{(old)} - \varphi_{i,j}^{(old)}}{V_T}\right)}{h_{x_1}^2} n_{i+1,j}^{(old)} + \frac{B\left(\frac{\varphi_{i-1,j}^{(old)} - \varphi_{i,j}^{(old)}}{V_T}\right)}{h_{x_1}^2} n_{i-1,j}^{(old)} + \frac{B\left(\frac{\varphi_{i,j+1}^{(old)} - \varphi_{i,j}^{(old)}}{V_T}\right)}{h_{x_2}^2} n_{i,j+1}^{(old)} + \frac{B\left(\frac{\varphi_{i,j-1}^{(old)} - \varphi_{i,j}^{(old)}}{V_T}\right)}{h_{x_2}^2} n_{i,j-1}^{(old)} -$$

$$\frac{q\left(\frac{n_{i,j}^{(old)} p_{i,j}^{(old)} - n_i^2}{\tau_p(n_{i,j}^{(old)} + n_i) + \tau_n(p_{i,j}^{(old)} + n_i)} + (n_{i,j}^{(old)} p_{i,j}^{(old)} - n_i^2)(C_n n_{i,j}^{(old)} + C_p p_{i,j}^{(old)})\right)}{\mu_n \varphi \tau}, \text{ pe } \Omega_h \quad (4.7)$$

Rezolvând sistemul algebric (4.7) prin una dintre metodele numerice iterative, în cadrul unui ciclu intern, a fost calculată valoarea $\bar{\delta}_n(x_1, x_2)$ cu o exactitate prestabilită. Cu valoarea $\bar{\delta}_n(x_1, x_2)$ a fost calculată noua aproximare pentru concentrația de electroni

$$\overline{n^{(new)}}(x_1, x_2) = \overline{n^{(old)}}(x_1, x_2) + \bar{\delta}_n(x_1, x_2) \quad (4.8)$$

Valoarea curentă a concentrației de electroni ($n^{(new)}$) a fost calculată iterativ până la atingerea exactității prestabilite.

La ieșirea din ciclul intern (4.7), (4.8) au fost calculate valorile curente ale concentrației de electroni $n^{(new)}$ în nodurile de pe frontieră, conform relațiilor (3.15), (3.17).

În cazul sistemului algebric neliniar (3.14) au fost folosite notațiile:

$\overline{p^{(ex)}}(x_1, x_2)$ fiind soluția exactă a sistemului (3.14), $\overline{p^{(old)}}(x_1, x_2)$ soluția sistemului calculată la iterația precedentă, $\overline{p^{(new)}}(x_1, x_2)$ soluția sistemului calculată la iterația curentă, $\overline{p^{(in)}}(x_1, x_2)$ valoarea inițială a concentrației de goluri, iar $\bar{\delta}_p(x_1, x_2)$ eroarea.

Astfel, au fost obținute relațiile pentru iterațiile inițială și cea curentă, respectiv

$$\overline{p^{(ex)}}(x_1, x_2) = \overline{p^{(in)}}(x_1, x_2) + \bar{\delta}_p(x_1, x_2), \quad (4.9)$$

$$\overline{p^{(new)}}(x_1, x_2) = \overline{p^{(old)}}(x_1, x_2) + \bar{\delta}_p(x_1, x_2), \quad (4.10)$$

Liniaizarea sistemului algebric neliniar (3.14) cu aplicarea algoritmului metodei lui Newton a fost realizată prin substituirea relației (4.9) în sistemul (3.14). Pentru separarea sistemului (3.14) de celelalte două sisteme algebrice (3.5), (3.13) în calitate de necunoscută a fost lăsată concentrația de goluri $\overline{p^{(new)}}(x_1, x_2)$, exprimată prin relația (4.10), celelalte două necunoscute au fost luate ca constante cu valori calculate la iterația precedentă $\overline{\varphi^{(old)}}(x_1, x_2)$ și $\overline{n^{(old)}}(x_1, x_2)$.

A fost obținut sistemul algebric liniar în necunoscuta $\bar{\delta}_p(x_1, x_2)$

$$\begin{aligned}
& \left(\frac{B\left(\frac{\varphi_{i+1,j}^{(old)} - \varphi_{i,j}^{(old)}}{V_T}\right) + B\left(\frac{\varphi_{i-1,j}^{(old)} - \varphi_{i,j}^{(oldk)}\right)}{h_{x_1}^2} + \frac{B\left(\frac{\varphi_{i,j+1}^{(old)} - \varphi_{i,j}^{(old)}\right) + B\left(\frac{\varphi_{i,j-1}^{(old)} - \varphi_{i,j}^{(old)}\right)}{h_{x_2}^2} \right) \delta_{p,ij} - \\
& \frac{B\left(\frac{\varphi_{i,j}^{(old)} - \varphi_{i+1,j}^{(old)}}{V_T}\right)}{h_{x_1}^2} \delta_{p,i+1,j} - \frac{B\left(\frac{\varphi_{i,j}^{(old)} - \varphi_{i-1,j}^{(old)}\right)}{h_{x_1}^2} \delta_{p,i-1,j} - \frac{B\left(\frac{\varphi_{i,j}^{(old)} - \varphi_{i,j+1}^{(old)}\right)}{h_{x_2}^2} \delta_{p,i,j+1} - \\
& \frac{B\left(\frac{\varphi_{i,j}^{(old)} - \varphi_{i,j-1}^{(old)}\right)}{h_{x_2}^2} \delta_{p,i,j-1} = \\
& - \left(\frac{B\left(\frac{\varphi_{i+1,j}^{(old)} - \varphi_{i,j}^{(old)}}{V_T}\right) + B\left(\frac{\varphi_{i-1,j}^{(old)} - \varphi_{i,j}^{(old)}\right)}{h_{x_1}^2} + \frac{B\left(\frac{\varphi_{i,j+1}^{(old)} - \varphi_{i,j}^{(old)}\right) + B\left(\frac{\varphi_{i,j-1}^{(old)} - \varphi_{i,j}^{(old)}\right)}{h_{x_2}^2} \right) \cdot p_{i,j}^{(old)} + \\
& \frac{B\left(\frac{\varphi_{i,j}^{(old)} - \varphi_{i+1,j}^{(old)}}{V_T}\right)}{h_{x_1}^2} p_{i+1,j}^{(old)} + \frac{B\left(\frac{\varphi_{i,j}^{(old)} - \varphi_{i-1,j}^{(old)}\right)}{h_{x_1}^2} p_{i-1,j}^{(old)} + \frac{B\left(\frac{\varphi_{i,j}^{(old)} - \varphi_{i,j+1}^{(old)}\right)}{h_{x_2}^2} p_{i,j+1}^{(old)} + \frac{B\left(\frac{\varphi_{i,j}^{(old)} - \varphi_{i,j-1}^{(old)}\right)}{h_{x_2}^2} p_{i,j-1}^{(old)} - \\
& q \left(\frac{n_{i,j}^{(old)} p_{i,j}^{(old)} - n_i^2}{\tau_p (n_{i,j}^{(old)} + n_i) + \tau_n (p_{i,j}^{(old)} + n_i)} + (n_{i,j}^{(old)} p_{i,j}^{(old)} - n_i^2) (C_n n_{i,j}^{(old)} + C_p p_{i,j}^{(old)}) \right) / (\mu_p \varphi_\tau), \\
& \text{pe } \Omega_h
\end{aligned} \tag{4.11}$$

Rezolvând sistemul algebric (4.11) prin una dintre metodele numerice iterative în cadrul unui ciclu intern, a fost calculată valoarea $\bar{\delta}_p(x_1, x_2)$ cu o exactitate prestabilită. Valoarea $\bar{\delta}_p(x_1, x_2)$ a fost folosită la determinarea noii aproximări pentru concentrația de goluri

$$\overline{p^{(new)}}(x_1, x_2) = \overline{p^{(old)}}(x_1, x_2) + \bar{\delta}_p(x_1, x_2). \tag{4.12}$$

Valoarea curentă a concentrației de goluri ($p^{(new)}$) a fost calculată iterativ până la atingerea unei exactități prestabilite.

La ieșirea din ciclul intern (4.11), (4.12) au fost calculate valorile curente ale concentrației de goluri $p^{(new)}$ în nodurile de pe frontieră, conform relațiilor (3.15), (3.18).

Valorile curente ale potențialului electrostatic și cele ale cvasi-potențialelor lui Fermi pentru electroni și goluri au fost calculate în cadrul a trei cicluri interne. Noile valori ale funcțiilor necunoscute au fost verificate în cadrul unui ciclu comul celor trei necunoscute, la ieșirea din care tensiunea aplicată la anod din exterior a fost mărită iterativ, cu pași mici. Acest proces iterativ a durat cât timp calculele numerice au rămas stabile. Pentru a avea posibilitatea de a compara și identifica cel mai eficient algoritm numeric de rezolvare a problemei modelării

matematice a dispozitivului semiconductor procesul a durat până la aplicarea din exterior anodului tensiunea de $V_a = 0,2 A$. Eficiența algoritmilor a fost determinată în baza parametrilor enumerați mai sus și rezultatele sunt expuse în următorul tabel. Calculele soluției au fost obținute cu o exactitate de ordinul 10^{-10} , pentru o rețea de noduri (16×32) .

Tabel 4.1: Numărul mediu de iterații. Cazul tripletului de necunoscute $\{\varphi, n \text{ și } p\}$ cu aplicarea MGC&MGBiC și a Metodei Newton

nr. de iterații interne, φ	nr. de iterații interne n	nr. de iterații interne, p	nr. total de iterații	nr. de iterații externe	Durata (minute)
64	36	36	136	25	1

CONCLUZII GENERALE ȘI RECOMANDĂRI

Cercetarea realizată în domeniul modelării matematice a proceselor neliniare în dioda semiconductoare a condus la următoarele concluzii și recomandări.

Problema modelării matematice a proceselor neliniare în dispozitivul semiconductor, este o problemă neliniară mixtă, cu condiții la frontieră de două tipuri Dirichlet și Neumann ce acționează pe porțiuni disjuncte ale ei. A fost examinat cazul staționar.

În cadrul cercetării au fost obținute următoarele rezultate:

1. A fost elaborat modelul numeric ce modelează matematic funcționalitatea diodei semiconductoare cu aplicarea *metodei iterațiilor simple* în două variante, prin setul de variabile: *potențialul electrostatic, concentrațiile de electroni și goluri* și prin setul: *potențialul electrostatic, cvasi-potențialele lui Fermi pentru electroni și goluri*.
2. A fost elaborat modelul numeric ce modelează matematic funcționalitatea diodei semiconductoare cu aplicarea *metodelor iterative triunghiulare* în două variante, prin setul de variabile: *potențialul electrostatic, concentrațiile de electroni și goluri* și prin setul: *potențialul electrostatic, cvasi-potențialele lui Fermi pentru electroni și goluri*.
3. A fost elaborat modelul numeric ce modelează matematic funcționalitatea diodei semiconductoare cu aplicarea *metodei variaționale a parametrilor Cebîșev pe două nivele* într-o variantă, prin setul de variabile: *potențialul electrostatic, cvasi-potențialele lui Fermi pentru electroni și goluri*.
4. A fost elaborat modelul numeric ce modelează matematic funcționalitatea diodei semiconductoare cu aplicarea *metodei iterative a parametrilor Cebîșev pe trei nivele* într-o variantă, prin setul de variabile: *potențialul electrostatic, cvasi-potențialele lui Fermi pentru electroni și goluri*.
5. A fost elaborat modelul numeric ce modelează matematic funcționalitatea diodei semiconductoare cu aplicarea *metodei semi iterative a gradientilor conjugați* într-o variantă, prin setul de variabile: *potențialul electrostatic, cvasi-potențialele lui Fermi pentru electroni și goluri*.
6. A fost elaborat modelul numeric ce modelează matematic funcționalitatea diodei semiconductoare cu aplicarea *combinată a metodelor numerice* într-o variantă, prin setul de variabile: *potențialul electrostatic, concentrațiile de electroni și goluri*. Algoritmii numerici au fost elaborați cu utilizarea următoarelor combinații ale metodelor numerice: *metoda parametrilor Cebîșev pe două nivele & metoda gradientilor bi conjugați, metoda parametrilor Cebîșev pe trei*

nivele & metoda gradientilor bi conjugați, metoda gradientilor conjugați & metoda gradientilor bi conjugați.

7. A fost elaborat modelul numeric ce modelează matematic funcționalitatea diodei semiconductoare, prin setul de variabile: *potențialul electrostatic, concentrațiile de electroni și goluri*, cu aplicarea metodei lui Newton la liniarizarea ecuațiilor în derivate parțiale neliniare, fiind o abordare diferită față de cea aplicată în capitolele precedente.

Astfel, în baza constatărilor de mai sus, pot fi formulate următoarele contribuții personale în obținerea rezultatelor enumerate:

1) Implementarea schemelor în diferențe și a schemei Scharfetter-Gummel ecuațiilor cu derivate parțiale neliniare și condițiilor la frontieră, pentru problema cercetării, astfel obținându-se echivalenții discreți ai acestora: capitolul 2, paginile 39-42; capitolul 3, paginile 88-93.

2) Aplicarea ideilor metodelor Gummel și Newton pentru liniarizarea sistemelor algebrice și astfel realizând trecerea la echivalenții liniari ai acestora: capitolul 2, paginile 47; 48; capitolul 4, paginile 122-126.

3) Sistemelor algebrice liniare obținute le-au fost aplicate scheme ale diverselor metode iterative, semi-iterative, variaționale, pe două nivele, pe trei nivele. În cazul fiecărei metode iterative și a schemei acesteia, fiind în situația calculului numeric, care datorită erorilor și altor factori pot duce la divergența rezultatelor față de cele așteptate, au fost făcute studii individuale. Unul dintre aceste studii, cazul Metodei parametrilor Cebîșev pe două nivele, a fost descris în capitolul 2, paginile 63-65.

4) Fiecare model numeric elaborat a fost implementat sub formă de program MatLab pe sistemul de calcul, al cărui parametri sunt descriși în Introducere. Softul corespunzător, poate fi folosit la modelarea reală a dispozitivelor semiconductoare.

Rezultatele obținute contribuie la extinderea ariei de cercetare pentru modelarea matematică a proceselor neliniare în dispozitivele semiconductoare. Modelele numerice elaborate au valoare științifică datorită gradelor de noutate, diversitate, originalitate aplicate în cadrul realizării lor pentru rezolvarea problemei dispozitivului semiconductor, cu identificarea celor mai eficiente. Rezultatele obținute pot fi utilizate în diverse domenii, atât cu caracter științific cât și aplicativ.

Recomandări și sugestii privind cercetările de perspectivă

1) Rezultatele cunoscute până în prezent arată că cercetările ce țin de modelarea matematică a proceselor neliniare în dispozitivele semiconductoare, cât și argumentarea lor teoretică, nu sunt finalizate. Însăși rezultatele obținute și prezentate în teză au dus la extinderea domeniului de soluționare a problemelor neliniare.

2) O direcție de realizare a unei viitoare cercetări, ce ține de obținerea algoritmilor numerici eficienți care modelează matematic procesele neliniare în dispozitivele semiconductoare ar fi utilizarea metodei Newton mai pe larg și nu doar la etapa de liniarizare. Câțiva algoritmi de realizare a acestei direcții sunt descriși în Anexa 3.

3) O altă direcție a unei viitoare cercetări, ce ține de obținerea algoritmilor numerici eficienți care modelează matematic procesele neliniare în dispozitivele semiconductoare ar fi utilizarea calculului paralel.

Principalele rezultate științifice, obținute în cadrul cercetării, au fost prezentate la următoarele conferințe:

1. PAȚIUC V., SPRINCEAN G. *Algoritmul de calcul paralel a parametrilor în dispozitivele semiconductoare*. Modelare Matematică, Optimizare și Tehnologii Informaționale (MMOTI 2014). Conferința Internațională. În: materialele conferinței, vol. I, Chișinău, 25-28 martie 2014, ediția a 4-a, pp. 174-183.
2. SPRINCEAN G. *Calcularea parametrilor în dispozitivele semiconductoare*. Tendințe Contemporane ale Dezvoltării Științei: Viziuni ale Tinerilor Cercetători. Conferința Științifică Internațională a Doctoranzilor. În: teze ale conferinței, Chișinău, 10 martie 2015, p. 41.
3. SPRINCEAN G. *Calcularea parametrilor în dispozitivele semiconductoare*. Integrarea prin Cercetare și Inovare (IPCI 2015). Conferința Științifică Națională cu Participare Internațională. În: rezumate ale comunicărilor, Chișinău, 10-11 noiembrie 2015, pp. 174-177.
4. SPRINCEAN G. *Chebyshev method for calculating parameters of semiconductor devices*. Mathematics & Information Technologies: Research and Education (MITRE-2016). International Conference. In: book of abstracts, Chisinau, June 23-26, 2016, 70-th edition, pp. 62-63.
5. SPRINCEAN G. *Calcularea parametrilor în dispozitivele semiconductoare utilizând metoda parametrilor Chebyshev*. Integrarea prin Cercetare și Inovare (IPCI 2016). Conferința Științifică Națională cu Participare Internațională. În: rezumate ale comunicărilor, Chișinău, 28-29 septembrie 2016, pp. 261-265..
6. PAȚIUC V., SPRINCEAN G. *A comparison of some numerical methods for semiconductor device problem*. The 25 Conference on Applied and Industrial Mathematics (CAIM-2017). International Conference. In: book of abstracts, Iași - România, September 14-17, 2017, pp. 54-55.
7. SPRINCEAN G. *A comparison of some numerical methods for semiconductor device problem*. International Conference on Applied and Pure Mathematics (ICAPM-2017), 5th edition. In: book of abstracts, Iași - România, November 2-5, 2017, pp. 21-22.

8. SPRINCEAN G. *Determinarea funcționalității diodei semiconductoare în spațiul bidimensional*. Modelare Matematică, Optimizare și Tehnologii Informaționale (MMOTI 2018). Conferința Internațională. În: materialele conferinței, Chișinău, 12-16 martie 2018, ediția a 5-a, pp. 193-200.
9. SPRINCEAN G. *A Comparison of Some Numerical Methods for Semiconductor Device Problem*. International Conference on Mathematics, Informatics and Information Technologies dedicated to the eminent scientist Valentin Belousov (MITI 2018): Alecu Russo Balti State University, Republic of Moldova. In: communications, April 19-21, 2018, pp. 23-24.
10. SPRINCEAN G. *Chebyshev parameters applied to modeling nonlinear processes in semiconductor devices*. The Fifth Conference of Mathematical Society of the Republic of Moldova (IMCS-55). International Conference. In: proceedings of the conference, Chisinau, september 28 - october 1 2019, pp. 237-242.
11. SPRINCEAN G. *Aplicarea metodelor directe la modelarea numerică a proceselor neliniare în dispozitivele semiconductoare*. Integrarea prin Cercetare și Inovare (IPCI 2019). Conferința Științifică Națională cu Participare Internațională. În: rezumate ale comunicărilor, Chișinău, 7-8 noiembrie 2019, pp. 271-276.
12. SPRINCEAN G. *Comparative analysis of linearization techniques when modeling nonlinear processes in semiconductor devices*. Mathematics & IT: Research and Education (MITRE-2021). The 75th International Conference. In: book of abstracts, Chisinau, July 01-03, 2021, p. 80.

BIBLIOGRAFIE

1. Editor CIARLET, P.G. HANDBOOK of NUMERICAL ANALYSIS: SCHILDERS, W.H.A, MATEN, E.J.W *Numerical Methods in Electromagnetics*, Volume 13, Serie's Editor: Philippe Ciarlet. Netherlands: ELSEVIER, 2005, 920 p. ISSN: 1570-8659.
2. САМАРСКИЙ, А. А. *Введение в численные методы*. Москва: Наука, 1987. 272 с.
3. BRĂTIANU, C., BOSTAN, V., COJOCIA, L, NEGREANU, G. *Metode numerice*. Bucuresti: Editura Tehnică, 1996. 212 p. ISBN: 973-98203-2-8.
4. САМАРСКИЙ, А.А. *Теория разностных схем*. Москва: Наука, 1983.
5. САМАРСКИЙ, А.А., НИКОЛАЕВ, Е.С. *Методы решения сеточных уравнений*. Москва: Наука, 1978, 591 с.
6. САМАРСКИЙ, А.А., ГУЛИН, А.В. *Численные методы*. Москва: Наука, 1989. 432с. ISBN 5-02-013996-3.
7. ANDREI, N. *Programarea matematică avansată*. București: Ed. Tehnică, TMCA, 1999. 879 p. ISBN 973-31-1387-0.
8. ANDREI, N. *An adaptive conjugate gradient algorithm for large-scale unconstrained optimization*. North-Holland: Elsevier - AMC, 2016, pp. 83 – 91. ISSN:0377-0427.
9. ANDREI, N. *Another conjugate gradient algorithm with guaranteed descent and conjugate conditions for large-scale unconstrained optimization*. US: Springer - JOTA, 2013, pp.159-182. ISSN:0377-0427.
10. HESTENES, M.R., STIEFEL, E. *Methods of Conjugate Gradients for Solving Linear Systems*. Journal of Research of the National Bureau of Standards 49 (1952), 409–436. ISSN: 0220-7234.
11. VAN DER VORST, H. A. *Bi-CGSTAB: A Fast and Smoothly Converging Variant of Bi-CG for the Solution of Nonsymmetric Linear Systems*. In: SIAM J. Sci. Stat. Comput, 1992. pp. 631–644. ISSN: 0091-3035.
12. VASILESKA, D., GOODNICK, S.M., KLIMECK, G. *Computational Electronics: Semiclassical and Quantum Device Modeling and Simulation*. Amazon: CRC Press, 2010, 782 pages. ISBN: 1420064835.
13. KOPRUCKI, T., GÄRTNER, K. *Generalization of the Scharfetter-Gummel scheme*. Vancouver: 13th International Conference on Numerical Simulation of Optoelectronic Devices (NUSOD), 2013. pp. 158-159. ISBN: 978-3-901578-26-7.
14. GROVE, A. S., *Fizica și tehnologia dispozitivelor semiconductoare [Physics and Technology of Semiconductor Devices]*, translated from the English by Mircea Bodea, Didona Niculescu, Nicolae Niculescu, Bucharest: Editura Tehnică, 1973. 502p. ISSN: 041-664.
15. Numerical Analysis. Historical Developments in the 20th Century, editat de BREZINSKI, C., WUYTACK, L.: SAAD, Y., VAN DER VORST, H.A., *Iterative solution of linear systems in*

the 20th century. Amsterdam: Ed. ELSEVIER, 2001, pp. 175 – 209. ISBN 0444506179.

16. Numerical Analysis. Historical Developments in the 20th Century, editat de BREZINSKI, C., WUYTACK, L.: BUTCHER J.C., VAN DER VORST, H.A. *Numerical methods for ordinary differential equation in the 20th century*. Amsterdam: Ed. ELSEVIER, 2001, pp. 449 – 479. ISBN: 0444506179.

17. LAKATOȘ, E.Șt. *Modelarea dispozitivelor semiconductoare active*. România: Ed. Matrixrom, 2009. 84 p. ISBN: 9736855694.

18. NICOLA, A., POPA, C. *Sparse Matrix Techniques in Scientific Computing*. Studies in Informatics and Control 18 (1), 2008, p.33. ISSN: 1222-9024.

19. POPA, C., JUNCU, Gh., NICOLA, A., UDRESCU, T. *Multigrid based preconditioning algorithms for diffusion-convection-reaction equations*. Romania: 8-th International Balkan Workshop on Applied Physics, 5-7 iulie, 2007. ISSN: 1221146X.

20. ION, S. *Diffusion Processes. Description and Numerical Approximation*. In: Topics in Applied Mathematics and Mathematical Physics (Editori: C. Grunfeld, S. Ion, G. Marinoschi), Editura Academiei Romane, 2008. pp.170-200. ISSN: 59424327.

21. ION, Anca-Veronica *Approximate solutions for a convection-diffusion problem, via a post-processed non-linear Galerkin method*. XIVth Conference on Applied and Industrial Mathematics-CAIM XIV, Chisinau, Republica Moldova: August 17-19, 2006. ISBN 978-973-27-1719.

22. LIU, Q.F., CHEN, Z., YIN, W.Y. *An Arbitrary-Order LOD-C Method and its Stability and Numerical Dispersion*. IEEE Trans. On Ante. and Propag., vol. 57, no. 8, Aug. 2009. pp. 2409-2417. ISBN: 1558-2221.

23. GUMMEL, H. K. *A self-consistent iterative scheme for one-dimensional steady state transistor calculation*. IEEE Trans. Electron Devices, vol. ED-11, 1964. pp.455-465. ISSN: 1557-9646.

24. PINAKPANI, Nayak. *1D Drift Diffusion simulator for modeling pn - junction Diode*, Arizona State University: 2008, pp.11-13.

25. LAKATOȘ, E.Șt. *Aspecte generale ale simulării în microelectronică (partea I)*. România: Electrotehnica, Electrica, Automatica (EEA), vol.64, nr.3, 2016, pp. 75-82. ISSN: 1582-5175.

26. LAKATOȘ, E.Șt. *Aspecte generale ale simulării în microelectronică (partea II)*. România: Electrotehnica, Electrica, Automatica (EEA), vol.64, nr.4, 2016, pp. 83-87. ISSN: 1582-5175.

27. LAKATOȘ, E.Șt. *Aspecte generale ale simulării în microelectronică (partea III)*. România: Electrotehnica, Electrica, Automatica (EEA), vol.65, nr.2, 2017, pp. 154-159. ISSN: 1582-5175.

LISTA LUCRĂRILOR PUBLICATE LA TEMA TEZEI

1 Articole în reviste științifice

1.1 SPRINCEAN, G. *Modelarea matematică a diodei semiconductoare pentru cazul unidimensional.* În: Studia Universitatis Moldaviae, 2017, nr.7 (107), seria ”Științe exacte și economice”, pp. 159-165. ISSN 1857-2073.

1.2 SPRINCEAN, G. *Numerical simulation of nonlinear processes in semiconductor devices with the application of the Newton’s method for linearization.* În: BASM (Buletinul Academiei de Științe a Republicii Moldova. Matematica.), 2020, nr.3 (94), pp. 97–108. ISSN 1024–7696.

2 Articole în culegeri științifice

2.1 PAȚIUC V., SPRINCEAN G. *Algoritmul de calcul paralel a parametrilor în dispozitivele semiconductoare.* Modelare Matematică, Optimizare și Tehnologii Informaționale (MMOTI 2014). Conferința Internațională. În: materialele conferinței, vol. I, Chișinău, 25-28 martie 2014, ediția a 4-a, pp. 174-183. ISBN 978-9975-62-365-0.

2.2 SPRINCEAN, G. *Calcularea parametrilor în dispozitivele semiconductoare.* Integrarea prin Cercetare și Inovare (IPCI 2015). Conferința Științifică Națională cu Participare Internațională. În: rezumate ale comunicărilor, Chișinău, 10-11 noiembrie 2015, pp. 174-177. ISBN 978-9975-71-705-2.

2.3 SPRINCEAN, G. *Calcularea parametrilor în dispozitivele semiconductoare utilizând metoda parametrilor Chebyshev.* Integrarea prin Cercetare și Inovare (IPCI 2016). Conferința Științifică Națională cu Participare Internațională. În: rezumate ale comunicărilor, Chișinău, 28-29 septembrie 2016, pp. 261-265. ISBN 978-9975-71-814-1.

2.4 SPRINCEAN, G. *Determinarea funcționalității diodei semiconductoare în spațiul bidimensional.* Modelare Matematică, Optimizare și Tehnologii Informaționale (MMOTI 2018). Conferința Internațională. În: materialele conferinței, Chișinău, 12-16 martie 2018, ediția a 5-a, pp. 193-200. ISBN 978-9975-62-421-3.

2.5 SPRINCEAN, G. *Chebyshev parameters applied to modeling nonlinear processes in semiconductor devices.* The Fifth Conference of Mathematical Society of the Republic of Moldova (IMCS-55). International Conference. În: proceedings of the conference, Chisinau, september 28 - october 1 2019, pp. 237-242. ISBN 978-9975-68-378-4.

2.6 SPRINCEAN, G. *Aplicarea metodelor directe la modelarea numerică a proceselor neliniare în dispozitivele semiconductoare.* Integrarea prin Cercetare și Inovare (IPCI 2019).

Conferința Științifică Națională cu Participare Internațională. În: rezumate ale comunicărilor, Chișinău, 7-8 noiembrie 2019, pp. 271-276. ISBN 978-9975-149-47-1.

3 Teze în culegeri științifice

3.1. SPRINCEAN, G. *Calcularea parametrilor în dispozitivele semiconductoare*. Tendințe Contemporane ale Dezvoltării Științei: Viziuni ale Tinerilor Cercetători. Conferința Științifică Internațională a Doctoranzilor. În: teze ale conferinței, Chișinău, 10 martie 2015, p. 41. ISBN 987-9975-4257-2-8.

3.2. SPRINCEAN, G. *Chebyshev method for calculating parameters of semiconductor devices*. Mathematics & Information Technologies: Research and Education (MITRE-2016). International Conference. In: book of abstracts, Chisinau, June 23-26, 2016, 70-th edition, pp. 62-63. ISBN 978-9975-71-794-6.

3.3. PAȚIUC, V., SPRINCEAN, G. *A comparison of some numerical methods for semiconductor device problem*. The 25 Conference on Applied and Industrial Mathematics (CAIM-2017). International Conference. In: book of abstracts, Iași - România, September 14-17, 2017, pp. 54-55.

3.4. SPRINCEAN, G. *A comparison of some numerical methods for semiconductor device problem*. International Conference on Applied and Pure Mathematics (ICAPM-2017), 5th edition. In: book of abstracts, Iași - România, November 2-5, 2017, pp. 21-22.

3.5. SPRINCEAN, G. *A Comparison of Some Numerical Methods for Semiconductor Device Problem*. International Conference on Mathematics, Informatics and Information Technologies dedicated to the eminent scientist Valentin Belousov (MITI 2018): Alecu Russo Balti State University, Republic of Moldova. In: communications, April 19-21, 2018, pp. 23-24. ISBN 978-9975-3214-7-1.

3.6. SPRINCEAN, G. *Comparative analysis of linearization techniques when modeling nonlinear processes in semiconductor devices*. Mathematics & IT: Research and Education (MITRE-2021). The 75th International Conference. In: book of abstracts, Chisinau, July 01-03, 2021, p. 80.

ADNOTARE

la teza de doctor "Modelarea matematică a proceselor neliniare în dispozitivele semiconductoare", înaintată de către Galina Sprincean, pentru obținerea titlului de doctor în științe matematice, la specialitatea 112.03 – Cibernetică Matematică și Cercetări Operaționale, elaborată la Universitatea de Stat din Moldova, Chișinău, anul 2021.

Structura tezei: Teza este scrisă în limba română și conține introducere, patru capitole, concluzii generale și recomandări, bibliografie din 113 titluri, 3 anexe, 126 pagini cu text de bază, 4 figuri, 16 tabele. Rezultatele obținute sunt publicate în 14 lucrări științifice.

Cuvinte-cheie: Procese neliniare, dispozitive semiconductoare, modelarea matematică, scheme cu diferențe finite, schema lui Scharfetter-Gummel, algoritmul lui Gummel, metoda lui Newton, metode iterative, metode semi-iterative, metode variaționale.

Scopul și obiectivele lucrării: Elaborarea și argumentarea teoretică a algoritmilor numerici de modelare matematică a proceselor neliniare într-un dispozitiv semiconductor, cu identificarea celor mai eficienți. Iar ca obiective: stabilirea cadrului modelării numerice, elaborarea modelului conceptual, folosind notații matematice sau grafice adecvate, realizarea modelului matematic, verificarea și validarea algoritmilor numerici elaborați, efectuarea experimentelor numerice generatoare de rezultate, analiza și interpretarea rezultatelor obținute.

Noutatea și originalitatea științifică: Problema modelării matematice a proceselor neliniare a fost și rămâne una dintre cele mai dificile probleme ale fizicii semiconductoarelor, pe motiv că procesele neliniare sunt puțin controlabile. În teză, au fost elaborați, argumentați teoretic și identificați cei mai eficienți algoritmi numerici ce modelează matematic procesele neliniare într-un dispozitiv semiconductor, care a presupus rezolvarea unui sistem de ecuații cu derivate parțiale, neliniare și cu două tipuri de condiții la frontieră care acționează pe porțiuni disjuncte.

Rezultate obținute: A fost rezolvată problema care modelează matematic procesele neliniare în dispozitivul semiconductor. Rezultat ce duce la extinderea ariei problemelor neliniare rezolvabile, completată fiind cu algoritmi de soluționare a sistemelor cu derivate parțiale, neliniare și cu două tipuri de condiții la frontieră ce acționează pe porțiuni disjuncte. Aria de aplicare a acestor rezultate este largă atât în plan teoretic (elaborarea algoritmilor și mai eficienți ce modelează matematic procesele neliniare în dispozitivele semiconductoare) cât și practic (cu implementarea algoritmilor elaborați în cadrul cercetării prin crearea softului corespunzător, care poate fi folosit la modelarea reală a dispozitivelor semiconductoare).

Semnificația teoretică și valoarea aplicativă a lucrării: Extinderea ariei de cercetare și aplicare a modelării matematice la soluționarea problemelor neliniare, cazul dispozitivului semiconductor. Rezultatele obținute pot fi ca suport pentru un curs opțional la masterat.

Implementarea rezultatelor științifice: Rezultatele științifice vor fi utilizate în procesul de instruire la Facultățile de Matematică și Informatică, Fizică și Inginerie ale Universității de Stat din Moldova, în cadrul predării disciplinelor de specializare. Algoritmii elaborați au fost realizați sub formă de programe MatLab.

АННОТАЦИЯ

к докторской диссертации "Математическое моделирование нелинейных процессов в полупроводниковых устройствах", выдвинутой Галиной Спринчан для получения степени доктора математических наук по специальности 112.03 – Математическая Кибернетика и Оперативные Исследования, разработана в Государственном Университете Молдовы, Кишинев, в 2021 году.

Структура диссертации: Диссертация написана на румынском языке и содержит введение, четыре главы, общие выводы и рекомендации, библиографию из 113 наименований, 3 приложений, 126 страниц с основным текстом, 4 рисунка, 16 таблиц. Результаты опубликованы в 14 научных статьях.

Ключевые слова: Нелинейные процессы, полупроводниковые устройства, математическое моделирование, схемы конечных разностей, схема Шарфеттера-Гуммеля, алгоритм Гуммеля, метод Ньютона, итеративные методы, полуэтеративные методы, вариационные методы.

Цель и задачи работы: Разработка и теоретическая аргументация численных алгоритмов математического моделирования нелинейных процессов в полупроводниковом устройстве с выявлением наиболее эффективных. И в качестве целей: установление основы численного моделирования, разработка концептуальной модели с использованием соответствующих математических или графических обозначений, реализация математической модели, проверка и валидация разработанных численных алгоритмов, проведение численных экспериментов, генерирующих результаты, анализ и интерпретация полученных результатов.

Научная новизна и оригинальность: Проблема математического моделирования нелинейных процессов была и остается одной из самых сложных проблем физики полупроводников на том основании, что нелинейные процессы плохо контролируются. В диссертации были разработаны, теоретически аргументированы и определены наиболее эффективные численные алгоритмы, математически моделирующие нелинейные процессы в полупроводниковом устройстве, которые предполагали решение системы уравнений с частичными, нелинейными производными и с двумя типами граничных условий, действующих на непересекающиеся части.

Полученные результаты: Решена проблема математического моделирования нелинейных процессов в полупроводниковом устройстве. Результат который приводит к расширению области решаемых нелинейных задач, дополняя алгоритмами решения систем с частичными, нелинейными производными и двумя типами граничных условий, действующих на непересекающиеся части. Область применения этих результатов широка как в теоретической плане (разработка еще более эффективных алгоритмов математического моделирования нелинейных процессов в полупроводниковых устройствах), так и в практической (с внедрением разработанных в ходе исследования алгоритмов путем создания соответствующего программного обеспечения, которое может быть использовано для реального моделирования полупроводниковых приборов).

Теоретическая значимость и прикладная ценность работы: Расширение области исследований и применения математического моделирования для решения нелинейных задач, случай полупроводникового устройства. Полученные результаты могут быть основой для факультативного курса магистратуры.

Внедрение научных результатов: Научные результаты будут использованы в процессе обучения на факультетах математики и информатики, физики и инженерии Государственного Университета Молдовы в рамках преподавания специальных дисциплин. Разработанные алгоритмы были реализованы в виде программ MatLab.

ANNOTATION

of the PhD thesis "Mathematical Modeling of nonlinear processes in semiconductor devices", submitted by Galina Sprincean for obtaining the title of doctor in Mathematical Sciences, at specialty 112.03 - Mathematical Cybernetics and Operational Research, was developed at the State University of Moldova, Chisinau, in 2021.

Thesis structure: The thesis is written in Romanian and contains introduction, four chapters, general conclusions and recommendations, bibliography of 113 titles, 3 annexes, 126 pages with basic text, 4 figures, 16 tables. The results are published in 14 scientific papers.

Keywords: Nonlinear processes, semiconductor devices, mathematical modeling, finite difference schemes, Scharfetter-Gummel scheme, Gummel's algorithm, Newton's method, iterative methods, semi-iterative methods, variational methods.

Purpose and objectives of the work: Elaboration and theoretical argumentation of numerical algorithms for mathematical modeling of nonlinear processes in a semiconductor device, with the identification of the most efficient ones. And as objectives: establishing the framework of numerical modeling, elaboration of the conceptual model, using appropriate mathematical or graphical notations, realization of the mathematical model, verification and validation of elaborated numerical algorithms, performing numerical experiments generating results, analysis and interpretation of results.

Results obtained: The problem that mathematically models nonlinear processes in the semiconductor device has been solved. Result that leads to the extension of the area of solvable nonlinear problems, being completed with algorithms for solving systems with partial, nonlinear derivatives and with two types of boundary conditions that act on disjoint portions. The area of application of these results is wide both theoretically (developing even more efficient algorithms that mathematically model nonlinear processes in semiconductor devices) and practically (with the implementation of the algorithms developed in the research by creating the appropriate software, which can be used for real modeling of semiconductor devices).

Scientific novelty and originality: The problem of mathematical modeling of nonlinear processes has been and remains one of the most difficult problems of semiconductor physics, on the grounds that nonlinear processes are uncontrollable. In the thesis, the efficient numerical algorithms that mathematically model nonlinear processes in a semiconductor device, which involved solving a system of equations with partial, nonlinear derivatives and two types of boundary conditions acting on disjoint portions, have been elaborated and theoretically argued.

Theoretical significance and applicative value of the work: Extending the area of research and application of mathematical modeling to solving nonlinear problems, the case of the semiconductor device. The results obtained can be used as support for an optional master's course.

Implementation of scientific results: The scientific results will be used in the training process at the Faculties of Mathematics and Computer Science, Physics and Engineering of the State University of Moldova, within the teaching of the specialization disciplines. The developed algorithms were developed in the form of MatLab programs.

SPRINCEAN GALINA

**MODELAREA MATEMATICĂ A PROCESELOR NELINIARE ÎN
DISPOZITIVELE SEMICONDUCTOARE**

112.03 – CIBERNETICĂ MATEMATICĂ ȘI CERCETĂRI OPERAȚIONALE

Rezumatul tezei de doctor în științe matematice

Aprobat spre tipar: 08.04.2022

Formatul hârtiei 60x84 1/16

Hârtie offset. Tipar RISO.

Tiraj 50 ex.

Coli de tipar: 2,0

Centrul editorial poligrafic al USM,

MD 2009, mun. Chișinău, str. A.Mateevici, 60