

UNIVERSITATEA DE STAT DIN MOLDOVA

Cu titlu de manuscris

C.Z.U. 519.6 (043.3)

SPRINCEAN GALINA

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

**112.03 – CIBERNETICĂ MATEMATICĂ ȘI CERCETĂRI OPERAȚIONALE**

Teza de doctor în ȘTIINȚE MATEMATICE

**Conducător științific:**

**Pațiu Vladimir**, doctor în științe fizico-matematice,

conferențiar universitar



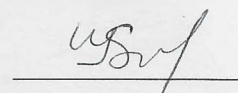
**Consultant științific:**

**Cataranciuc Sergiu**, doctor habilitat în științe fizico-matematice,

profesor universitar

**Autor:**

**Sprincean Galina**



CHIȘINĂU 2022

**© Sprincean Galina, 2022**

## CUPRINS

CUPRINS	3
ADNOTARE	5
LISTA TABELELOR	8
LISTA FIGURILOR	9
LISTA ABREVIERILOR	10
INTRODUCERE	13
1 STADIUL ACTUAL AL CERCETĂRILOR DIN DOMENIUL MODELĂRII MATEMATICE A PROCESELOR NELINIARE ÎN DISPOZITIVELE SEMICONDUCTOARE	18
1.1 Modelarea matematică a proceselor neliniare în dispozitivele semiconductoare	18
1.2 Formularea matematică a problemei funcționalității dispozitivului semiconductor	24
1.3 Concluzii la capitolul 1	38
2 MODELAREA MATEMATICĂ A FUNCȚIONALITĂȚII DISPOZITIVULUI SEMICONDUCTOR PRIN POTENȚIALUL ELECTROSTATIC ȘI CVAZI- POTENȚIALELE LUI FERMI	41
2.1 Scheme cu diferențe finite aplicate la discretizarea ecuațiilor în modelarea numerică	41
2.2 Algoritmul modelării numerice a proceselor neliniare în dispozitivul semiconductor cu aplicarea Metodei Iterațiilor Simple (MIS)	49
2.3 Algoritmul modelării numerice a proceselor neliniare în dispozitivul semiconductor cu aplicarea Metodelor Iterative Triunghiulare (MIT)	54
2.3.1 Algoritmul modelării numerice a proceselor neliniare în dispozitivul semiconductor cu aplicarea Metodei Gauss-Seidel (MGS)	55
2.3.2 Algoritmul modelării numerice a proceselor neliniare în dispozitivul semiconductor cu aplicarea Metodei Relaxării (MR)	59
2.4 Modelarea numerică a proceselor neliniare în dispozitivul semiconductor cu aplicarea parametrilor Cebîșev	65
2.4.1 Algoritmul modelării numerice cu aplicarea Metodei Parametrilor Cebîșev pe 2 Nivele (MPC2N)	65
2.4.2 Algoritmul modelării numerice cu aplicarea Metodei Parametrilor Cebîșev pe 3 Nivele (MPC3N)	74
2.5 Modelarea numerică a proceselor neliniare în dispozitivul semiconductor cu aplicarea metodelor iterative netaționare prin redirectionări	79
2.5.1 Metoda Gradientilor (MG)	80
2.5.2 Metoda Gradientilor Conjugăți (MGC)	83

2.5.3	Algoritmul modelării numerice a proceselor neliniare în dispozitivul semiconductor cu aplicarea Metodei Gradientilor Conjugați (MGC)-----	85
2.6	Concluzii la capitolul 2-----	91
3	MODELAREA MATEMATICĂ A PROCESELOR NELINIARE ÎN DISPOZITIVUL SEMICONDUCTOR PRIN POTENȚIALUL ELECTROSTATIC ȘI CONCENTRAȚII ALE SARCINILOR-----	94
3.1	Discretizarea ecuațiilor în derivate parțiale cu aplicarea diferențelor finite și a schemei lui Scharfetter Gummel-----	94
3.2	Modelarea numerică a proceselor neliniare în dispozitivul semiconductor cu aplicarea schemelor pe două nivele -----	100
3.2.1	Algoritmul numeric cu aplicarea Metodei Iterațiilor Simple (MIS) -----	104
3.2.2	Algoritmul numeric cu aplicarea Metodei Gauss-Seidel (MGS) -----	106
3.2.3	Algoritmul numeric cu aplicarea Metodei de Relaxare Superioară (MRS)-----	108
3.3	Algoritmi ai modelării numerice a proceselor neliniare în dispozitivul semiconductor cu aplicarea metodelor iterative combinat-----	110
3.3.1	Metoda Gradientilor Conjugați (MGC) -----	110
3.3.2	Metoda Gradientilor Bi-Conjugați (MGBiC) -----	111
3.3.3	Algoritmul numeric cu aplicarea MGC și a MGBiC-----	112
3.3.4	Algoritmul modelării numerice a dispozitivului semiconductor cu aplicarea MPC2N și a MGBiC-----	118
3.3.5	Algoritmul numeric cu aplicarea Metodelor Parametrilor Cebîșev pe 3 Nivele și cea a Gradientilor Bi Conjugați -----	120
3.4	Concluzii la capitolul 3-----	122
4	MODELAREA MATEMATICĂ A PROCESELOR NELINIARE ÎN DISPOZITIVUL SEMICONDUCTOR CU APLICAREA METODEI NEWTON -----	124
	CONCLUZII GENERALE ȘI RECOMANDĂRI -----	136
	BIBLIOGRAFIE-----	140
	ANEXE -----	147
	DECLARAȚIA PRIVIND ASUMAREA RĂSPUNDERII -----	152
	CV – UL AUTORULUI -----	153

## 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.

## LISTA TABELELOR

<b>Tabel 1.1</b> Notăția parametrilor normați .....	288
<b>Tabel 2.1</b> Numărul mediu de iterații. Cazul tripletului de necunoscute $\{ \phi, \varphi_n \text{ și } \varphi_p \}$ cu aplicarea MIS. ....	53
<b>Tabel 2.2:</b> Numărul mediu de iterații. Cazul tripletului de necunoscute $\{ \phi, \text{ și } \varphi_n \varphi_p \}$ cu aplicarea MGS .....	599
<b>Tabel 2.3:</b> Numărul mediu de iterații. Cazul tripletului de necunoscute $\{ \phi, \varphi_n \text{ și } \varphi_p \}$ cu aplicarea MRS.....	64
<b>Tabel 2.4:</b> Tabelul valorilor parametrului $\alpha$ , determinate experimental, cazul MPC2N.....	67
<b>Tabel 2.5:</b> Numărul mediu de iterații. Cazul tripletului de necunoscute $\{ \phi, \varphi_n \text{ și } \varphi_p \}$ cu aplicarea MPC2N.....	73
<b>Tabel 2.6:</b> Numărul mediu de iterații. Cazul tripletului de necunoscute $\{ \phi, \varphi_n \text{ și } \varphi_p \}$ cu aplicarea MPC3N.....	79
<b>Tabel 2.7:</b> Numărul mediu de iterații. Cazul tripletului de necunoscute $\{ \phi, \varphi_n \text{ și } \varphi_p \}$ cu aplicarea MGC.....	90
<b>Tabel 2.8:</b> Numărul mediu de iterații. Cazul tripletului de necunoscute $\{ \phi, \varphi_n \text{ și } \varphi_p \}$ pentru fiecare metodă iterativă aplicată în Capitolul 2. ....	91
<b>Tabel 3.1:</b> Numărul mediu de iterații. Cazul tripletului de necunoscute $\{ \phi, n \text{ și } p \}$ cu aplicarea MIS .....	106
<b>Tabel 3.2:</b> Numărul mediu de iterații. Cazul tripletului de necunoscute $\{ \phi, n \text{ și } p \}$ cu aplicarea MGS.....	107
<b>Tabel 3.3:</b> Numărul mediu de iterații. Cazul tripletului de necunoscute $\{ \phi, n \text{ și } p \}$ cu aplicarea MRS .....	11809
<b>Tabel 3.4:</b> Numărul mediu de iterații. Cazul tripletului de necunoscute $\{ \phi, n \text{ și } p \}$ cu aplicarea MGC & MGBiC .....	12018
<b>Tabel 3.5:</b> Numărul mediu de iterații. Cazul tripletului de necunoscute $\{ \phi, n \text{ și } p \}$ cu aplicarea MPC2N & MGBiC .....	120
<b>Tabel 3.6:</b> Numărul mediu de iterații. Cazul tripletului de necunoscute $\{ \phi, n \text{ și } p \}$ cu aplicarea MPC3N & MGBiC.....	122
<b>Tabel 3.7:</b> Numărul mediu de iterații. Cazul tripletului de necunoscute $\{ \phi, n \text{ și } p \}$ pentru fiecare metodă iterativă aplicată în Capitolul 3. ....	122
<b>Tabel 4.1:</b> Numărul mediu de iterații. Cazul tripletului de necunoscute $\{ \phi, n \text{ și } p \}$ cu aplicarea MGC&MGBiC și a Metodei Newton .....	134



## LISTA FIGURILOR

<b>Figura 1.1</b> Geometria diodei semiconductoare. -----	32
<b>Figura 1.2</b> Suprafața funcției Gauss $G(x_1, x_2, a, b, \alpha)$ cu $a = 3 \cdot 10^{-6}$ , $b = 1 \cdot 10^{-6}$ , $\alpha = 0.5 \cdot 10^{-6}$ -----	35
<b>Figura 2.1</b> Amplasarea nodurilor în cadrul rețelei. -----	42
<b>Figura 2.2</b> Dependența numărului iterațiilor de parametrul Metodei Cebîșev pe Două Nivele -----	69

## LISTA ABREVIERILOR

$\vec{J}_{nc}, \vec{J}_{pc}, \vec{J}_c$	densitatea de curent în semiconductorul extrinsec, situat în câmp electronic pentru electroni, goluri, cu contribuția ambelor tipuri de purtători de sarcină
$\vec{J}_{nd}, \vec{J}_{pd}$	densitatea de curent în semiconductorul extrinsec, asupra căruia acționează gradientii ai sarcinilor electrice pentru electroni, goluri
$D_n, D_p$	constantele de difuziune pentru purtătorii de sarcină, electroni și goluri
$\bar{E}$	intensitatea câmpului electric
$N_A$	concentrația de atomi ale impurităților acceptoare, <i>atomi/cm<sup>3</sup></i>
$N_A^*$	sarcini negative fixe în condițiile ETD
$N_D$	concentrația de atomi ale impurităților donore, <i>atomi/cm<sup>3</sup></i>
$N_D^*$	sarcini pozitive fixe în condițiile ETD
$V_{th}$	tensiunea termică
$W_F$	nivelul Fermi
$W_C$	nivelul minim al benzii de conducție
$W_i$	nivelul de energie intrinsec
$W_v$	nivelul maxim al benzii de valență
$k_B$	
$n_0$	sarcini negative mobile în condițiile ETD
$p_0$	sarcini pozitive mobile în condițiile ETD
$\mu_n, \mu_p$	mobilități ale purtătorilor de sarcină, electroni și goluri
$\Delta W$	ecartul benzii de energie interzise
ETD	echilibru termodinamic
NETD	neechilibru termodinamic
q	sarcina electronului
T	temperatura rețelei
$n, p$	concentrații ale purtătorilor de sarcini, electroni și goluri
$\rho$	densitatea de sarcină electrică totală în semiconductor
$\sigma$	conductivitatea materiei
$\nabla$	gradient
$\nabla^2$	operatorul lui Laplace
$\varepsilon$	permitivitatea electrică a materialului semiconductor

$G_n, G_p$	ratele de generare ale electronilor și golurilor
$R_n, R_p$	ratele de recombinare ale electronilor și golurilor
$\rho_s$	densitatea totală de sarcină electrică în semiconductor
$\varphi$	potențialul electrostatic
PSF	valori ale mărimilor, care caracterizează funcționarea componentei, la un moment dat, formează <i>punctul static de funcționare</i>
RSES	regiunea de sarcină electrică spațială
JS	joncțiune statică
$\varepsilon_0$	constanta electrică
$\varepsilon_r$	permitivitatea relativă a cristalului semiconductor
$RG_n, RG_p$	ratele de recombinare-generare pentru electroni
$J_n, J_p$	intensități ale curenților
$n_i$	concentrația purtătorilor de sarcină echilibrați
$n_0, p_0$	concentrații ale purtătorilor de sarcină în echilibru
$\tau_{n_0}, \tau_{p_0}$	caracteristici ale timpilor pentru purtătorii de sarcină în echilibru
$\alpha_n, \alpha_p$	coeficienții de captare ai purtătorilor de sarcină
$N_t$	concentrația capcanelor de captare ai purtătorilor de sarcină
$\varphi_n, \varphi_p$	cvasi-potențialele lui Fermi pentru electroni și goluri
$\phi_n, \phi_p$	cvasi-nivelele lui Fermi pentru electroni și goluri
$\Omega$	domeniul de definiție al problemei cercetării
$\Gamma = \Gamma_D \cup \Gamma_N$	frontiera domeniului de definiție al problemei cercetării
$\Gamma_D, \Gamma_N$	porțiunea frontierei la care sunt conectați electrozii anod și catod, porțiunea rămasă a frontierei
$\bar{\Omega}$	întreg domeniul de definiție al problemei cercetării
$N$	concentrația de impurități a semiconductorului
$G$	funcția lui Gauss
$N_{D_n}, N_{D_n, max}$	alierarea stratului epitaxial al semiconductorului, a substratului epitaxial
$N_{A_p, max}$	valoarea maximală de implantare a profilului de difuziune
$l_{x_1}, l_{x_2}, l_a, l_i, l_j$	dimensiuni ale domeniului de definiție, conform Figurii 1.1
$\rho_n, \rho_p$	variabilele lui Slotboom pentru electroni și goluri
$V_a, V_c$	tensiunea aplicată la anod, catod
MDD	modelul Drift-Diffusion

$h_{x_1}, h_{x_2}$	pasul rețelei pe orizontală, verticală
$(x_1^{(i)}, x_2^{(j)})$	coordonatele nodului în rețeaua fixată
H	spațiul Hilbert

## INTRODUCERE

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.

**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 cercetării** a fost elaborarea și argumentarea teoretică a algoritmilor numerici de modelare matematică a proceselor neliniare într-un dispozitiv semiconductor, cu identificarea celor mai eficienți. Modelarea numerică presupune proiectarea unui model real sau teoretic, execuția acestui model pe un sistem de calcul și analiza rezultatelor obținute. Modelul numeric elaborat trebuie să reflecte cât mai fidel proprietățile și comportarea sistemului modelat. Numai în acest caz concluziile la care se ajunge, analizând rezultatele obținute în cadrul efectuării experimentelor numerice generatoare de rezultate, pot fi aplicate și în cazul sistemului real. Modelarea numerică a unui sistem real, în marea majoritate a cazurilor, este un proces iterativ care impune deseori reluarea unor etape până la obținerea unor rezultate concludente.

**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 viteza de 2,1 GHz, fiecare), RAM 4,1 GB, GPU pe 32 biți, 200Hz, memorie video de 1,8 GB.

La tema tezei au fost realizate 14 publicații (2 articole în reviste de specialitate, 6 articole în culegeri științifice și 6 teze în culegeri științifice). Dintre aceste publicații, 7 articole sunt fără coautori.

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 [1,5,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17,19,20]. Tot în acest capitol a fost formulată matematic problema cercetării și anume cea a modelării matematice a proceselor neliniare în dispozitivul semiconductor.

În capitolul 2 ***”Modelarea matematică a funcționalității dispozitivului semiconductor prin potențialul electrostatic și cvasi-potențialele lui Fermi”*** [2,3,4,12,14,15,21,24,25], a fost rezolvată problema dispozitivului semiconductor, enunțată prin potențialul electrostatic și cvasi-potențialele lui Fermi. Problema dispozitivului semiconductor a presupus rezolvarea unui sistem de trei ecuații cu derivate parțiale neliniare: ecuația lui Poisson și ecuațiile continuității pentru electroni și goluri. În cadrul modelării numerice a dispozitivului semiconductor, algoritmi elaborați și descriși în acest capitol, au folosit suplimentar soluțiile analitice pentru densități ale curenților de electroni și goluri și cele ale cvasi-potențialelor lui Fermi pentru electroni și goluri. Condiții la frontieră ale problemei sunt de două tipuri, Dirichlet și Neumann și acționează pe porțiuni disjuncte ale ei. În cadrul acestui capitol au fost propuși 6 algoritmi numerici, pentru rezolvarea problemei dispozitivului semiconductor. În concluzia capitolului a fost identificat cel mai efektiv, cu recomandările de rigoare.

În capitolul 3 ***”Modelarea matematică a proceselor neliniare în dispozitivul semiconductor prin potențialul electrostatic și concentrații ale sarcinilor”*** [6,7,17,82], 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 cu derivate parțiale neliniare, cu două tipuri de condiții la frontieră. În cadrul acestui capitol au fost descriși algoritmi numerici care suplimentar au utilizat soluțiile analitice ale densităților de curent pentru electroni și goluri, și cele ale concentrațiilor de sarcini pentru electroni și goluri. În cadrul acestui capitol au fost propuși alți 6 algoritmi numerici, pentru rezolvarea problemei dispozitivului semiconductor. În concluzia capitolului a fost identificat cel mai efektiv, cu recomandări de rigoare.

În capitolul 4 ***”Modelarea matematică a proceselor neliniare în dispozitivul semiconductor cu aplicarea metodei Newton”*** [30,31,112] a fost descris un singur algoritm numeric ce rezolvă problema dispozitivului semiconductor. Problema a presupus rezolvarea aceluiași sistem de trei ecuații cu derivate parțiale, neliniare, cu două tipuri de condiții la frontieră. Soluțiile analitice, utilizate suplimentar, sunt aceleași ca în capitolul 3.

În cadrul acestui capitol, spre deosebire de capitolele anterioare, a fost propusă o nouă abordare de elaborare a algoritmilor numerici. Etapa de liniarizare a ecuațiilor sistemului a fost realizată cu utilizarea ideii metodei Newton. Rezultatele testării algoritmului elaborat au fost expuse la finalul capitolului, iar ca recomandări a fost propusă o schemă (Anexa 3), care propune și descrie alți algoritmi ce pot fi elaborați cu utilizarea metodei Newton pentru rezolvarea problemei dispozitivului semiconductor.



În **Concluzii și Recomandări** au fost enumerate rezultatele importante, obținute în cadrul cercetării, enunțată importanța lor științifică și aplicativă. În același capitol au fost făcute recomandări ce țin de aplicarea practică a algoritmilor elaborați și de eficientizarea lor, într-o viitoare cercetare.

# 1 STADIUL ACTUAL AL CERCETĂRILOR DIN DOMENIUL MODELĂRII MATEMATICE A PROCESELOR NELINIARE ÎN DISPOZITIVELE SEMICONDUCTOARE

## 1.1 Modelarea matematică a proceselor neliniare în dispozitivele semiconductoare

Fizica solidului, apărută în perioada 1930-1935, s-a dezvoltat datorită implicării în realizări tehnice importante ale secolului al XX-lea. Drept exemple pot fi dispozitivele semiconductoare (dioda, tranzistorul bipolar, etc.), laserul, memoria magnetică, supraconductibilitatea, microelectronica, domeniul de vârf al tehnologiei secolului al XX-lea. Influența progresului Fizicii semiconductoarelor asupra Microelectronicii este descrisă în lucrări ale multor savanți, cum ar fi lucrarea lui Wolf S. "Silicon Processing for the VLSI Era" [44], Lakatoș E.Șt. "Rolul fizicii în dezvoltarea microelectronicii" [43], Canțer S., Șișianu T. "Fizica și tehnologiile moderne" [85], etc.

La fabricarea dispozitivelor electronice active (dispozitive discrete de bază sau entități fizice într-un sistem electronic, utilizate pentru a influența electronii sau câmpurile asociate acestora) în calitate de materie primă sunt folosite materialele semiconductoare. Începuturile epocii componentelor electronice pe bază de semiconductori este anul 1904, iar descrierea dezvoltării acestei ramuri poate fi găsită în lucrări de specialitate, cum ar fi revista "Microelectronics Technologies and devices – SBMicro" [24, 28], în Grove A. S., "Fizica și tehnologia dispozitivelor semiconductoare" [42], Kireev P. S. "Fizica semiconductoarelor" [48], etc. Primul dispozitiv pe bază de semiconductori este construit în 1948 când în Statele Unite ale Americii a fost inventat "un dispozitiv de 22 cristale (semiconductor) cu trei electrozi", care putea să amplifice și să detecteze semnale electrice, denumit tranzistor.

De ce se folosesc materiale semiconductoare, în locul metalelor? Din punct de vedere al conductibilității electrice metalele conduc electricitatea rapid (practic instantaneu), datorită prezenței în volumul metalului a unui număr foarte mare ai electronilor liberi. Dar, un fapt foarte important este că în cazul semiconductoarelor un număr mic de "atomi străini", diferiți de atomii materiei de bază, pot influența impunător proprietățile electrice ale acestei materii.

Aproape toate dispozitivele electronice moderne sunt realizate cu materii semiconductoare. Caracteristicile electrice ale semiconductoarelor sunt influențate direct de modul în care interacționează atomii din structura materiilor utilizate. În lucrarea de față este vorba de dispozitive confecționate din siliciu. Materiile semiconductoare, simple sau

compuse, intrinseci (materii fără impurități) sau extrinseci (materii cu impurități), sunt structurate prin rețele atomice numite cristale. De exemplu, cristalul de siliciu are o rețea atomică tetraedrică, fiecare atom se învecinează cu alți patru atomi de același tip. Acest tip de rețea asigură o bună stabilitate a fiecărui atom de siliciu.

În cazul siliciului, pentru semiconductorul intrinsec la temperaturi scăzute și în absența unor factori energizanți legăturile covalente sunt satisfăcute, acesta comportându-se asemenea unui izolator ideal. La temperatura normală ( $T = 300\text{K}$ ) un număr de electroni au statistic o energie suficientă pentru a se rupe din legăturile covalente devenind liberi și participând la conducție, dacă există un câmp electric extern. Legăturile covalente rămase nesatisfăcute (vacanțele) se comportă asemenea unor sarcini pozitive numite goluri și participă la conducție alături de electroni. În semiconductoarele pure sau intrinseci numărul electronilor liberi este egal cu numărul golurilor, formând perechi *electron-gol*.

Semiconductoarele extrinseci sunt semiconductoare dopate cu impurități. În rețeaua cristalină, în cazul semiconductorului din siliciu, se introduc atomi străini trivalenți sau pentavalenți, care modifică tipul și numărul purtătorilor participanți la conducție. Într-un astfel de semiconductor vor exista un anumit tip de purtători majoritari, *electronii* la semiconductorul *tip n*, dopat cu atomi pentavalenți și *golurile* la semiconductorul *tip p*, dopat cu atomi trivalenți. Și în cazul semiconductoarelor extrinseci se păstrează mecanismele de generare ale perechilor electron-gol, drept urmare a excitației externe, dar numărul acestora este mic în comparație cu purtătorii produși de atomii străini.

Unul dintre factorii externi ce poate să producă mișcarea purtătorilor de sarcină între două regiuni ale semiconductorului este un câmp electric, care determină prezența *curenților de drift (câmp)*. O altă cauză ar fi existența gradientilor de concentrație. Ei pot fi induși de un gradient de temperatură de-a lungul suprafeței semiconductoare sau de iluminarea neomogenă, care determină prezența *curenților de difuzie*. În cazul prezenței gradientilor de concentrație purtătorii de sarcină difuzează din regiunea de concentrație mare în cea de concentrație mică.

În consecință, se poate afirma că există trei mecanisme de trecere în neechilibru a purtătorilor de sarcină: *driftul, difuzia și generare-recombinarea perechilor electron-gol*.

Deosebim semiconductoare dopate moderat (*semiconductoare nedegenerate*), semiconductoare puternic dopate (*semiconductoare degenerate*), Dolocan V. "Fizica joncțiunilor cu semiconductoare" [100].

În toate materiile solide (metale, semiconductoare și izolatoare) electronii aferenți fiecărui tip de atom au nivele de energie discrete. Prin interacțiunea unui număr foarte mare

de atomi, din diferite rețele cristaline, nivelele de energie ale electronilor se grupează în *benzi de energie permise*, separate prin *benzi de energie interzise* (având ecartul notat cu  $\Delta W = W_c - W_v$ , unde  $W_c$  este nivelul minim al benzii de conducție și  $W_v$  este nivelul maxim al benzii de valență, iar nivelul de energie intrinsec, notat cu  $W_i$ , este situat la  $\frac{1}{2}$  din  $\Delta W$ ). Nivelele de energie neocupate se delimitează de cele ocupate cu electroni prin nivelul Fermi, notat cu  $W_F$ .

Semiconductoarele extrinseci pe bază de siliciu, utilizate pe scară industrială la fabricarea de dispozitive electronice și de circuite integrate, sunt realizate cu impurități donoare (având concentrația de *atomi/cm<sup>3</sup>* notată cu  $N_D$ , de regulă impuritățile sunt atomi de fosfor) sau cu impurități acceptoare (având concentrația de *atomi/cm<sup>3</sup>* notată cu  $N_A$ , de regulă impuritățile sunt atomi de bor).

Conceptul de echilibru termodinamic (ETD) se definește ca un ansamblu de condiții fizice în care se află un mediu fizic fără a fi supus la acțiuni induse de câmpuri electrice, de câmpuri magnetice, de câmpuri electromagnetice, de radiații nucleare, de vibrații mecanice, de gradienti termici și de alte tipuri de "stres". În oricare altă situație de lucru mediile fizice operează în condiții de neechilibru termodinamic (NETD).

Pentru estimarea componentelor de curent în semiconductoare este necesar să se precizeze starea de neutralitate electrică la ETD. Semiconductorul se găsește în stare de echilibru termodinamic atunci când suma tuturor sarcinilor lui pozitive (sarcini pozitive mobile  $p_0$  și sarcini pozitive fixe  $N_D^*$ ) este egală cu suma tuturor sarcinilor lui negative (sarcini negative mobile  $n_0$  și sarcini negative fixe  $N_A^*$ ). Astfel, semiconductorul este în stare de echilibru termodinamic dacă are loc relația

$$p_0 + N_D^* = n_0 + N_A^*$$

unde  $p_0$  este concentrația de goluri,  $N_D^*$  concentrația impurităților donore,  $n_0$  concentrația de electroni mobili și  $N_A^*$  concentrația impurităților acceptoare.

Un semiconductor extrinsec, situat în câmp electric, are următoarele componente de curent  $\vec{J}_{nc}$  densitate de curent pentru electroni,  $\vec{J}_{pc}$  densitate de curent pentru goluri și  $\vec{J}_c$  densitate de curent cu contribuția ambelor tipuri de purtători de sarcină

$$\vec{J}_{nc} = \rho_n \vec{v}_n = -qn\vec{v}_n = -qn(-\mu_n\vec{E}) = qn\mu_n\vec{E}$$

$$\vec{J}_{pc} = \rho_p \vec{v}_p = qp\vec{v}_p = qp(\mu_p\vec{E}) = qp\mu_p\vec{E}$$

$$\vec{J}_c = \vec{J}_{nc} + \vec{J}_{pc} = q(n\mu_n + p\mu_p)\vec{E} = \sigma\vec{E} = \vec{E}/\rho$$

unde  $n$  și  $p$  sunt concentrațiile purtătorilor de sarcină la neechilibru pentru electroni și goluri,  $\mu_n$  și  $\mu_p$  sunt mobilități ale electronilor și golurilor,  $\vec{E}$  este intensitatea câmpului electric,  $\sigma$  conductivitatea materiei,  $\rho$  densitatea de sarcină electrică totală în semiconductor.

Semiconductorul extrinsec, asupra căruia acționează gradientii ai sarcinilor electrice, are următoarele componente de curent  $\vec{J}_{nd}$  drept densitatea de curent pentru electroni și  $\vec{J}_{pd}$  densitatea de curent pentru goluri

$$\vec{J}_{nd} = -q(\vec{F}_n) = -q(-D_n \nabla n) = q(D_n \nabla n)$$

$$\vec{J}_{pd} = q(\vec{F}_p) = q(-D_p \nabla p) = -q(D_p \nabla p)$$

unde  $D_n$  și  $D_p$  sunt constantele de difuziune pentru purtătorii de sarcină electroni și goluri, respectiv, exprimate prin relațiile lui Einstein  $D_n = \mu_n \frac{k_B T}{q} = \mu_n V_{th}$  și  $D_p = \mu_p \frac{k_B T}{q} = \mu_p V_{th}$ , cu tensiunea termică  $V_{th} = \frac{k_B T}{q}$ .

Componentele totale de curent, pentru electroni și goluri, într-un semiconductor extrinsec sunt exprimate prin densități de curent conform relațiilor ce urmează

$$\vec{J}_n = \vec{J}_{nc} + \vec{J}_{nd} = qn\mu_n \vec{E} + q(D_n \nabla n)$$

$$\vec{J}_p = \vec{J}_{pc} + \vec{J}_{pd} = qp\mu_p \vec{E} - q(D_p \nabla p)$$

$$\vec{J} = \vec{J}_n + \vec{J}_p + \varepsilon \left( \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \right)$$

unde  $\varepsilon \left( \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \right)$  reprezintă curentul de deplasare la frecvențe mari și foarte mari de lucru,  $\varepsilon$  fiind permitivitatea electrică a materialului semiconductor.

Principalele mecanisme de generare-recombinare a purtătorilor mobili de sarcină, care permit estimarea variației în timp a concentrațiilor acestora într-un punct al unui semiconductor, sunt următoarele modele fizice

- modele de *generare directă* (bandă-bandă, prin perechi electron-gol) sau *generare indirectă* (bandă-centru de captură sau trapă-bandă),
- modele de *recombinare directă* (bandă-bandă, prin perechi electron-gol) sau *recombinare indirectă* (bandă-centru de captură sau trapă-bandă),
- modelul de *tip Shockley-Read-Hall* (în cazul siliciului cu trapa intermediară  $W_t = (1/2)\Delta W$ ).

Ecuțiile de conservare, cărora li se mai spun ecuații ale continuității purtătorilor de sarcină, exprimă variația în timp a concentrației de electroni și goluri și au următoarele expresii

$$\frac{\partial n}{\partial t} = G_n - R_n - \frac{\nabla \vec{J}_n}{-q} = G_n - R_n + \frac{\nabla \vec{J}_n}{q} = G_n - \frac{n-n_0}{\tau_n} + \frac{1}{q} \frac{\partial \vec{J}_n}{\partial x}$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = G_p - R_p - \frac{\nabla \vec{J}_p}{q} = G_p - R_p - \frac{\nabla \vec{J}_p}{q} = G_p - \frac{p-p_0}{\tau_p} - \frac{1}{q} \frac{\partial \vec{J}_p}{\partial x}$$

unde  $G_n$  și  $G_p$  sunt ratele de generare ale electronilor și golurilor, respectiv,  $R_n$  și  $R_p$  ratele de recombinare pentru electroni și goluri.

Folosind expresiile componentelor de curent într-un semiconductor și ale legilor acestora setul de ecuații matematice pentru fizica materialelor semiconductoare este:

- ecuațiile pentru densități de curent ale purtătorilor de sarcină

$$\vec{J} = \vec{J}_n + \vec{J}_p + \varepsilon \left( \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \right)$$

$$\vec{J}_n = \vec{J}_{nc} + \vec{J}_{nd} = qn\mu_n \vec{E} + q(D_n \nabla n)$$

$$\vec{J}_p = \vec{J}_{pc} + \vec{J}_{pd} = qp\mu_p \vec{E} - q(D_p \nabla p)$$

- ecuațiile de conservare sau de continuitate ale purtătorilor de sarcină

$$\frac{\partial n}{\partial t} = G_n - R_n - \frac{\nabla \vec{J}_n}{-q} = G_n - R_n + \frac{\nabla \vec{J}_n}{q} = G_n - \frac{n-n_0}{\tau_n} + \frac{1}{q} \frac{\partial \vec{J}_n}{\partial x}$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = G_p - R_p - \frac{\nabla \vec{J}_p}{q} = G_p - R_p - \frac{\nabla \vec{J}_p}{q} = G_p - \frac{p-p_0}{\tau_p} - \frac{1}{q} \frac{\partial \vec{J}_p}{\partial x}$$

- ecuația lui Poisson

$$\nabla^2 \varphi = -\frac{\rho_s}{\varepsilon}$$

unde  $\rho_s = q(p + N_D^* - n - N_A^*)$  este densitatea totală de sarcină electrică în semiconductor,  $\nabla \varphi = -\vec{E}$  intensitatea câmpului electric generat de potențialul electric  $\varphi$ , cu  $\varepsilon$  permitivitatea electrică a materialului semiconductor.

Principalele tipuri de dispozitive electronice sunt diodele semiconductoare, tranzistoarele bipolare și tranzistoarele unipolare, ca elemente de circuit în regim static de lucru sau în curent continuu. Evaluarea punctului static de funcționare (PSF) al acestor dispozitive se realizează cu ajutorul relațiilor de curenți și tensiuni pentru fiecare circuit electronic utilizat. Estimarea mărimilor electrice, care definesc un PSF pentru oricare tip de dispozitiv electronic, este extrem de importantă la evaluarea parametrilor de regim dinamic sau de curent alternativ ale dispozitivelor electronice.

Din practică s-a constatat că caracteristica curent-tensiune a unei diode semiconductoare este influențată de mulți factori, cum ar fi *starea reală a suprafeței din aria joncțiunii statice JS* (care intensifică procesele de generare-recombinare a purtătorilor mobili de sarcină), *nivelele mari de injecție pentru concentrații ale purtătorilor minoritari de sarcină la marginile RSE*, comparabile cu cele ale purtătorilor majoritari de sarcină (caz în care contează rezistențele serie în regiunile neutre  $p$  și  $n$ ), *variațiile temperaturii de lucru*

(care induc modificări ale tensiunii continue pe o JS), etc. Teoria *joncțiunii pn* este descrisă în multe lucrări de specialitate, cum ar fi SHOCKLEY W. "*The Theory of P-N Junctions in Semiconductors and P-N Junction Transistors*" [101].

Dacă se aplică o tensiune inversă, având valoarea suficient de mare, *joncțiunea pn* pierde proprietatea de redresare. Acest fenomen se numește *străpungerea joncțiunii* și ține de creșterea puternică a curentului electric, astfel apare fenomenul de conducție. Creșterea curentului este datorată creșterii concentrației purtătorilor de sarcină.

Sunt de menționat cele trei mecanisme de străpungere a *joncțiunii pn*, străpungerea termică, străpungerea Zener (prin tunelare) și străpungerea prin avalanșă (ionizare) ) [41].

Impuritățile de tipul elementelor chimice cu valența III sau V determină în siliciu, în banda interzisă, nivele energetice. Aceste nivele energetice constituie centrii de *generarea-recombinare* eficienți, în sensul posibilității modificării controlate a timpului de viață al purtătorilor minoritari.

În cazul structurilor submicrone, cazul diodei semiconductoare, la modelarea matematică a acestora se impune utilizarea modelării numerice.

Soluțiile numerice nu elimină folosirea soluțiilor analitice, acestea din urmă fiind preferabile atunci când este posibil.

Modelarea numerică a dispozitivelor semiconductoare active, presupune prezicerea funcționării electrice a dispozitivelor. Pentru aceasta, inițial se folosesc modelele analitice ale acestor dispozitive, pentru simularea celor fizice. Modelele analitice pentru dispozitivele semiconductoare conțin următoarele date: *distribuția spațială a impurităților, principalele constante de material, rezistivitatea materialului semiconductor, mobilitățile purtătorilor de sarcină electrică, permitivitatea absolută a materialului semiconductor, timpii de viață ai purtătorilor de sarcină minoritari.*

Se presupune că funcționarea dispozitivelor semiconductoare poate fi modelată numeric prin rezolvarea sistemului de cinci ecuații neliniare în derivate parțiale, care descriu distribuția de câmp, de concentrații ale purtătorilor și de curent. În lucrările *HANDBOOK of NUMERICAL ANALYSIS*: Schilders W.H.A, Maten E.J.W "*Numerical Methods in Electromagnetics*" [1], Vasileska D., Goodnick S.M., Klimeck G. "*Computational Electronics: Semiclassical and Quantum Device Modeling and Simulation*" [19], Marinoschi, G. "*Mathematical models of diffusion in nonhomogeneous porous media*" [70], Feng Y. K., Hintz A. "*Simulation of sub-micrometer,*" [111], Liu Q.F., Chen Z., Yin W.Y. "*An Arbitrary-Order LOD-C Method and its Stability and Numerical Dispersion*" [89]

modelul analitic pentru funcționarea diodei semiconductoare, numit modelul drift-difuzie, conține ecuația lui Poisson (care depinde de potențialul electrostatic, de concentrațiile sarcinilor electrice și de intensitatea câmpului electric), ecuații ale continuității (ce depind de ratele de generare și ratele de recombinare pentru electroni și goluri), ecuațiile densităților de curenți pentru electroni și goluri, în absența câmpului magnetic și a gradientului de temperatură.

## **1.2 Formularea matematică a problemei funcționalității dispozitivului semiconductor**

Dezvoltarea oricărei scheme integrale, fiind chiar și una dintre cele mai simple, este imposibilă fără crearea modelului ei matematic ce descrie funcționalitatea ei. Mai mult, nivelul de dezvoltare în modelarea matematică ale elementelor schemei integrale și ale proceselor ei tehnologice, într-o mare măsură, determină nivelul de dezvoltare al microelectronicii. Odată cu creșterea cerințelor față de schema integrală și față de tehnologia ei de producere cresc și cerințele față de modelul ei matematic.

Baza fizico-matematică pentru modelarea numerică a dispozitivului semiconductor al unei scheme integrale, la nivel analitic, este un sistem de ecuații neliniare în derivate parțiale, care conține ecuația lui Poisson, ecuații ale continuității pentru purtătorii de sarcină și ecuația cinetică a lui Boltzmann.[1, 19, 42, 72]. Rezolvarea lui reprezintă o dificultate matematică. Astfel, pentru rezolvarea sistemului dispozitivului semiconductor a fost necesară folosirea soluțiilor analitice ale acestuia.

Mai simplu a fost scrierea sistemului de ecuații pentru dispozitivul semiconductor cu ajutorul aproximațiilor drift-difuzie. Trebuie de menționat că această aproximare este corect aplicabilă doar la mici deviații ale sistemului de la echilibrul termodinamic și în cazul sistemului ce descrie semiconductorul nedegenerat. Astfel, trebuie de luat în calcul limitele domeniului de aplicabilitate ale modelului drift-difuzie, care continuu să se îngustează, odată cu creșterea numărului de elemente ale schemei integrale. Cu toate acestea, datorită simplității de a fi implementat, modelul drift-difuzie este unul dintre cele mai recomandabile la modelarea numerică ale dispozitivelor semiconductoare.

La aproximarea drift-difuzie rezolvarea ecuației cinetice dă soluții simple pentru densități ale curenților de electroni și goluri, ca sumă ale densităților drift și ale densităților difuzie pentru curenții purtătorilor de sarcină. Astfel, sistemul de ecuații, în aproximarea drift-difuzie, nu conține ecuația cinetică a lui Boltzmann dar rezultatul rezolvării ei, expresii ale densităților de curenți pentru electroni și goluri.



Sistemul de ecuații pentru un element semiconductor, în aproximarea drift-difuzie, este format din următoarele ecuații

$$\nabla^2(\varphi) = \left(\frac{q}{\varepsilon_r \varepsilon_0}\right) (n - p + N_A - N_D) \quad (1.1)$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q} \operatorname{div}(J_n) - RG_n \quad \frac{\partial p}{\partial t} = \frac{1}{q} \operatorname{div}(J_p) - RG_p \quad (1.2)$$

unde (1.1) este ecuația lui Poisson, (1.2) sunt ecuațiile continuității pentru electroni și goluri, respectiv,  $\nabla^2$  operatorul lui Laplace,  $\varphi$  potențialul câmpului electric,  $q$  este sarcina electronului,  $\varepsilon_0$  constanta electrică,  $\varepsilon_r$  permitivitatea relativă a cristalului semiconductor,  $n$  și  $p$  sunt concentrațiile de electroni și goluri liberi, respectiv,  $N_A$  și  $N_D$  concentrațiile de acceptori și donori ionizați, respectiv,  $RG_{n(p)}$  sunt ratele de recombinare-generare pentru electroni și goluri, iar  $J_n$  și  $J_p$  intensități ale curenților de electroni și goluri, respectiv, definite prin relațiile

$$J_n = q D_n \Delta n + q n \mu_n \bar{E} \quad (1.3)$$

$$J_p = -q D_p \Delta p + q p \mu_p \bar{E} \quad (1.4)$$

unde  $D_n$  și  $D_p$  sunt coeficienții de difuzie pentru electroni și goluri, respectiv,  $\mu_n$  și  $\mu_p$  mobilități ale electronilor și gurilor, respectiv,  $\bar{E}$  intensitatea câmpului electric.

Exprimarea timpilor de recombinare-generare pentru electroni și goluri în dispozitivul semiconductor este determinată de mecanismul proceselor acestuia. Ca mecanisme de bază ale proceselor de recombinare-generare în dispozitivul semiconductor pot fi

1) *Recombinare-Generarea lui Shockley-Read-Hall*

$$RG_{SRH} = \frac{np - n_i^2}{\tau_{n_0}(p + n_i) + \tau_{p_0}(n + n_i)} \quad (1.5)$$

unde  $n$  și  $p$  sunt concentrații ale electronilor și gurilor în neechilibru,  $n_i$  concentrația electronilor (gurilor) echilibrați în semiconductorul intrinsec, exprimată prin relația  $n_i = (n_0 p_0)^{1/2}$  ( $n_0$  și  $p_0$  sunt concentrațiile de electroni și goluri, în echilibru),  $\tau_{n_0}$  și  $\tau_{p_0}$  sunt caracteristici ale timpilor pentru electroni și goluri, respectiv, exprimate prin relațiile  $\tau_{n_0} = (\alpha_n N_t)^{-1}$  și  $\tau_{p_0} = (\alpha_p N_t)^{-1}$ , definite de coeficienții de captare ai electronilor neechilibrați ( $\alpha_n$ ) și gurilor neechilibrate ( $\alpha_p$ ) cu ajutorul capcanelor cu concentrația ( $N_t$ ) (în expresia (1.5) s-a presupus că nivelul capcanelor coincide cu nivelul lui Fermi în semiconductorul propriu, adică este amplasat la mijlocul benzii interzise).

2) *Recombinare-Generarea lui Auger (pentru concentrații mari ale purtătorilor liberi de sarcini)*

$$RG_{SRH} = (np - n_i^2)(A_n n + A_p p) \quad (1.6)$$

unde  $A_n, A_p$  sunt coeficienții recombinării Auger pentru electroni și goluri, respectiv.

Este important de menționat că expresiile (1.5),(1.6) sunt aplicabile doar în *regim stabil* (adică la o continuă generare a purtătorilor de sarcină și este satisfăcută egalitatea  $RG_n = RG_p$ ).

Dacă în ecuațiile continuității pentru electroni și goluri (1.2) sunt substituite expresiile intensităților curenților (1.3)(1.4) și ale ratelor de recombinare-generare (1.5)(1.6), luând în calcul că intensitatea câmpului electric  $\vec{E} = -grad \varphi$  (în lipsa câmpului magnetic), se obține un sistem de trei ecuații în derivate parțiale neliniare de trei variabile, potențialul electrostatic ( $\varphi$ ), concentrația electronilor liberi ( $n$ ) și concentrația golurilor libere ( $p$ ).

Setul de variabile  $\{\varphi, n, p\}$  este unul dintre trei seturi, în raport cu care poate fi rezolvat sistemul de ecuații al problemei dispozitivului semiconductor. În calitate de alte două seturi de variabile pot fi folosite  $\{\varphi, \varphi_n, \varphi_p\}$ , unde  $\varphi$  este potențialul electrostatic,  $\varphi_n$  și  $\varphi_p$  fiind cvasi-potențialele lui Fermi pentru electroni și goluri, respectiv, sau setul de variabile  $\{\varphi, \phi_n, \phi_p\}$ , pentru electroni și goluri, respectiv, cu  $\phi_n = exp(-\varphi_n)$  și  $\phi_p = exp(-\varphi_p)$  [58].

În raport cu seturile de variabile  $\{\varphi, \varphi_n, \varphi_p\}$  și  $\{\varphi, \phi_n, \phi_p\}$  sistemul fundamental de ecuații al dispozitivului semiconductor este scris implicit. Pentru a trece la cazul explicit este necesar de a exprima concentrațiile de electroni și goluri prin potențialul electrostatic și prin cvasi-nivelele lui Fermi.

Considerând cazul dispozitivului semiconductor nedegenerat, ceea ce presupune că repartiția Boltzmann este adevărată, sunt aplicabile relațiile pentru exprimarea concentrațiilor de electroni și goluri

$$n_0 = N_c exp\left(-\frac{E_c - F}{kT}\right), \quad p_0 = N_v exp\left(-\frac{E_v - F}{kT}\right) \quad (1.7)$$

unde  $N_c$  și  $N_v$  sunt densitățile efective ale stărilor în banda de conducție și în banda de valență, respectiv,  $E_c$  și  $E_v$  semnifică energiile corespunzătoare limitei inferioare a benzii de conducție și limitei superioare a benzii de valență, respectiv,  $F$  drept nivelul lui Fermi,  $k$  constanta lui Boltzmann,  $T$  este temperatura termodinamică.

Având în vedere că în semiconductorul intrinsec concentrațiile de electroni și goluri liberi echilibrați sunt egale  $n_i = p_i = N_c exp\left(-\frac{E_c - F_i}{kT}\right) = N_v exp\left(-\frac{E_v - F_i}{kT}\right)$ , relația (1.7) poate fi rescrisă astfel

$$n_0 = n_i exp\left(-\frac{F - F_i}{kT}\right) \quad \text{și} \quad p_0 = n_i exp\left(-\frac{F - F_i}{kT}\right) \quad (1.8)$$

unde  $F_i$  este nivelul lui Fermi în semiconductorul intrinsec.

Relațiile (1.8) sunt adevărate doar în cazul semiconductorului în stare de echilibru. La ieșirea din starea de echilibru concentrația de electroni  $n$  deja nu mai este egală cu  $n_0$ , iar concentrația de goluri  $p \neq p_0$  și  $np \neq n_i^2$ . Pentru păstrarea formei de exprimare a concentrațiilor purtătorilor de sarcină neechilibrați sub forma (1.8) au fost introduse noi notații, cvasi-nivelele lui Fermi pentru electroni  $F_n$  și pentru goluri  $F_p$ , mărimi ce nu sunt egale. Astfel, dacă semiconductorul nu se găsește în stare de echilibru expresiile concentrațiilor de electroni și goluri au forma

$$n = n_i \exp\left(-\frac{F_n - F_i}{kT}\right) \quad \text{și} \quad p = n_i \exp\left(-\frac{F_p - F_i}{kT}\right) \quad (1.9)$$

Poziția nivelului lui Fermi în semiconductorul intrinsec  $F_i$  depinde de poziția limitei superioare a bandei de valență  $E_v$  și de poziția limitei inferioare a bandei de conducție  $E_c$  ( $F_i \approx (E_c + E_v)/2$ ), care poate să se modifice odată cu modificarea potențialului electrostatic  $\varphi$  în spațiu.

Notând potențialul termic prin  $\varphi_T = kT/q$ , sunt obținute următoarele exprimări ale concentrațiilor purtătorilor de sarcină pentru electroni și goluri, respectiv

$$n = n_i \exp\left(\frac{\varphi - \varphi_n}{\varphi_T}\right) \quad \text{și} \quad p = n_i \exp\left(\frac{\varphi_p - \varphi}{\varphi_T}\right) \quad (1.10)$$

unde  $\varphi_n = -\frac{F_n}{q}$ , și  $\varphi_p = -\frac{F_p}{q}$  sunt cvasi-potențialele lui Fermi pentru electroni și goluri, respectiv.

Folosind expresiile (1.10) și relațiile lui Einstein  $D_{n(p)} = \mu_{n(p)}\varphi_T$  (adevărate pentru semiconductoarele nedegenerate) expresiile pentru densitățile purtătorilor de sarcină (1.3),(1.4) pot fi rescrise sub o formă mai simplă

$$J_n = -q \mu_n n_i \exp\left[\frac{(\varphi - \varphi_n)}{\varphi_T}\right] \nabla \varphi_n \quad J_p = -q \mu_p n_i \exp\left[\frac{(\varphi_p - \varphi)}{\varphi_T}\right] \nabla \varphi_p \quad (1.11)$$

Utilizând expresiile concentrațiilor de electroni și goluri (1.10) ale densităților curenților purtătorilor de sarcină (1.11), sistemul fundamental de ecuații al dispozitivului semiconductor poate fi scris sub formă explicită, având ca variabile tripletele  $\{\varphi, \varphi_n, \varphi_p\}$  sau  $\{\varphi, \phi_n, \phi_p\}$ .

Utilizarea seturilor de variabile  $\{\varphi, n, p\}$  și  $\{\varphi, \phi_n, \phi_p\}$  este de nedorit deoarece funcțiile  $n, p, \phi_n, \phi_p$  depind exponențial de cvasi-nivelele lui Fermi, ceea ce precondiționează creșterea erorilor de calcul în procesul iterativ la rezolvarea sistemului de ecuații al problemei dispozitivului semiconductor. Aceste erori pot fi micșorate odată cu creșterea numărului de iterații, ceea ce ar duce însă la creșterea timpului de calcul.

Găsirea soluției analitice a sistemului de ecuații pentru problema dispozitivului semiconductor (chiar și la utilizarea aproximării drift-difuzie) este greoaie. Pentru obținerea soluțiilor analitice poate fi folosită așa numita *metoda aproximărilor regionale*. Esența metodei constă în divizarea suprafeței dispozitivului semiconductor în *regiuni cvasi-neutre* (regiuni dominate de purtători de sarcină liberi) și *regiuni ale purtătorilor spațiali* (regiuni ce duc lipsă de purtători de sarcină, de exemplu regiunile joncțiunilor pn). Pentru găsirea soluției analitice a sistemului problemei dispozitivului semiconductor mai pot fi folosite și alte aproximări, ca exemple ar fi precăutarea unei repartiții liniare a impurităților, excluderea recombinărilor purtătorilor liberi în bandele de trecere pn, presupunerea unei dopări slabe, etc.

Astfel, în caz general rezolvarea sistemului de ecuații pentru problema dispozitivului semiconductor necesită utilizarea metodelor numerice.

Rezolvarea numerică a sistemului de ecuații în derivate parțiale neliniare a fost realizată începând cu operația de normare a parametrilor de intrare. În tabelul de mai jos sunt aduse câteva exemple de normare

**Tabel 1.1 Notăția parametrilor normați**

Parametrul normat	Notăția parametrului normat	Notăția parametrului de normalizare
Coordonata	$x$	$x_0 = \max(x)$
Coeficientul de difuzie a purtătorului de sarcină	$D_n, D_p$	$D_0 = \max(D_n, D_p)$
Timpul, timpii de existență	$t, \tau_{n0}, \tau_{p0}$	$x_0^2/D_0$
Potențialul electrostatic și cvasi-potențialele lui Fermi	$\varphi, \varphi_n, \varphi_p$	$\varphi_T = kT/e$
Concentrațiile purtătorilor de sarcină și a concentrațiilor de impurități	$n, p, N_D, N_A$	$n_i$
Mobilitatea	$\mu_n, \mu_p$	$D_0/\varphi_T$

În raport cu tabelul de mai sus și ținând cont de relațiile (1.10)(1.11), sistemul de ecuații pentru problema dispozitivului semiconductor (1.1)(1.2), are forma

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = \gamma \left( \exp(\varphi - \varphi_n) - \exp(\varphi_p - \varphi) + N_A - N_D \right) \quad (1.12)$$

$$\exp(\varphi - \varphi_n) \left( \frac{\partial\varphi}{\partial t} - \frac{\partial\varphi_n}{\partial t} \right) = \frac{\partial J_n}{\partial x} - R G_n \quad (1.13)$$

$$\exp(\varphi_p - \varphi) \left( \frac{\partial\varphi_p}{\partial t} - \frac{\partial\varphi}{\partial t} \right) = \frac{\partial J_p}{\partial x} - R G_p \quad (1.14)$$

unde 
$$\gamma = \frac{qn_i x_0^2}{\varepsilon \varepsilon_0 \varphi_T}, \quad J_n = -\exp(\varphi - \varphi_n) \frac{\partial\varphi_n}{\partial x}, \quad J_p = -\exp(\varphi_p - \varphi) \frac{\partial\varphi_p}{\partial x} \quad (1.15)$$

Utilizarea metodelor numerice la rezolvarea sistemului de ecuații pentru problema dispozitivului semiconductor impune discretizarea domeniului continuu de căutare a soluției printr-o mulțime de puncte, numite noduri. Toate mărimile sistemului, care se modifică continuu în domeniul de definiție, sunt discretizate, adică prezentate sub forma funcțiilor de rețea a valorilor cărora sunt calculate doar în nodurile rețelei. Evident, cu cât este mai mic pasul rețelei cu atât funcția de rețea este mai aproape de cea continuă. În urma discretizării unei ecuații diferențiale are loc trecerea la un sistem algebric de ecuații. Rezolvarea sistemului algebric duce la determinarea valorilor funcțiilor de rețea.

Există două metode clasice de discretizare a ecuațiilor diferențiale. Una dintre ele este *Metoda diferențelor finite (MDF)*, cea de a doua fiind *Metoda elementelor finite (MEF)*. Diferența calitativă ce ține de aplicarea acestor metode poate fi exprimată succint astfel, la utilizarea MDF toate derivatele din ecuația diferențială dată sunt înlocuite cu diferențe finite în fiecare nod aparte, la aplicarea MEF este egalată cu zero integrala de la suma tuturor acestor diferențe finite pe tot domeniul de definiție. Fiecare metodă are plusurile și neajunsurile sale. În cercetarea dată a fost utilizată MDF, considerată fiind mai eficientă în cazul problemei dispozitivului semiconductor.

Există mai mulți algoritmi de realizare a discretizării ecuațiilor diferențiale cu ajutorul diferențelor finite, descrise în multe lucrări de specialitate, cum ar fi Самарский, А.А. "Теория разностных схем" [3], Яненко, Н.Н. "Метод дробных шагов решения многомерных задач математической физики" [112], etc.

Forma condițiilor la frontieră a problemei dispozitivului semiconductor depinde de domeniul de căutare a soluției:

a) pe frontiera cu contact Ohm-ic

$$\varphi_{i^*} = U_{i^*} + \ln\left(\left[\frac{(N_{D i^*} - N_{A i^*})^2}{4} + 1\right]^{1/2} + \frac{(N_{D i^*} - N_{A i^*})}{2}\right), \quad \varphi_{n i^*} = \varphi_{p i^*} = U_{i^*},$$

unde  $U_{i^*}$  este valoarea potențialului din exterior în nodul de pe frontieră  $i^*$ .

b) pe frontiera distanțată de banda activă potențialul poate fi considerat aproximativ invariabil

$$\varphi_{i^*} = \varphi_{i^* \pm 1}, \quad \varphi_{n i^*} = \varphi_{n i^* \pm 1}, \quad \varphi_{p i^*} = \varphi_{p i^* \pm 1}$$

c) pe frontiera vecină cu un dielectric (se consideră că în dielectrice nu este câmp)

$$\frac{(\varphi_{i^* \pm 1} - \varphi_{i^*})}{(x_{i^* \pm 1} - x_{i^*})} = \sigma_{i^*}, \quad J_{n i^* \pm 1/2} = R_{S i^*}, \quad J_{p i^* \pm 1/2} = -R_{S i^*},$$

unde  $\sigma_{i^*}$  este densitatea sarcinii pe suprafață corespunzătoare frontierei, normată,  $R_{S i^*}$  este viteza de modificare a concentrației purtătorilor de sarcină din contul recombinărilor la

suprafață,  $R_{s_i^*} = \frac{\exp(\varphi_{p_i^*} - \varphi_{n_i^*}) - 1}{(\exp(\varphi_{i^*} - \varphi_{n_i^*}) + 1) / s_{p_i^*} + (\exp(\varphi_{p_i^*} - \varphi_{i^*}) + 1) / s_{n_i^*}}$ , unde  $s_{n_i^*}$ ,  $s_{p_i^*}$  sunt vitezele de recombinare ale electronilor și golurilor pe frontiera respectivă (se presupune că nivelul de capcane este la mijlocul zonei interzise).

Potențialele în nodurile rețelei apar neliniar în ecuațiile sistemului algebric, obținute în urma discretizării ecuațiilor neliniare în derivate parțiale. Acest gen de ecuații este eficient de rezolvat folosind metoda lui Newton, care constă în înlocuirea variabilei inițiale  $x$ , în raport cu care sistemul nu este liniar, cu o variabilă nouă ce reprezintă creșterea mică a variabilei date  $\delta x$ , exprimată prin relația  $\delta x_i^{(k+1)} = x_i^{(k+1)} - x_i^{(k)}$ , unde  $i$  este indicele nodului,  $(k)$  și  $(k+1)$  sunt ordinea iterațiilor Newton precedentă și curentă, respectiv. În rezultatul substituției variabilei date cu variabila creșterii mici a ei se trece la un sistem algebric liniar. Astfel, pornind de la valoare inițială  $x_i^{(0)}$  a variabilei date, rezolvând sistemul algebric liniar obținut prin schimbul de variabilă se calculează valoarea curentă a variabilei  $\delta x_i^{(k+1)}$ , care este folosită pentru calcularea valorii curente a variabilei  $x_i^{(k+1)}$ , mai apoi folosită la rezolvarea iterativă a sistemului, drept aproximare la următoarea iterație. Procesul iterativ cu utilizarea metodei Newton continuă până când este atinsă exactitatea prestabilită a soluției.

Sistemul de ecuații liniare în raport cu potențialii poate fi rezolvat și prin metode directe (ca exemplu, prin metoda lui Gauss). Metoda lui Gauss permite de a găsi soluția după un număr finit de pași, dar necesită un volum mare de memorie. Insuficiența de memorie se resimte în cazul modelării ”bi-”, sau ”tri-”, dimensionale.

Ca urmare a discretizării sistemului de ecuații neliniare în derivate parțiale pentru dispozitivul semiconductor și a liniarizării sistemului algebric obținut se trece la un sistem algebric liniar ce poate fi rezolvat prin metode iterative. Metode iterative aplicate la modelarea numerică a proceselor neliniare în dispozitivul semiconductor în cadrul acestei cercetări

- *Metode iterative pe două nivele*, descrierea cărora poate fi găsită în lucrările lui Самарский, А.А., Николаев, Е.С. ”Методы решения сеточных уравнений” [4], Самарский А.А., Гулин А.В. ”Численные методы” [5] și în alte lucrări.

- *Metode iterative pe trei nivele*, descrise în lucrarea lui Самарский, А.А., Николаев Е.С. ”Методы решения сеточных уравнений” [4] și în alte lucrări.

- *Metode iterative triunghiulare*, descrierea cărora poate fi găsită în Ильин, В.П. ”Методы конечных разностей и конечных объёмов для эллиптических уравнений” [34],

în Abdelwahab Kharab and Ronald B Guenther "An introduction to numerical methods" [113], în Pană Gh., Carp M.C. "Tehnici de simulare. Aplicații în ingineria electrică și electronică" [94] și în alte lucrări.

- *Metode variaționale, descrise în lucrările Andrei, N. "An adaptive conjugate gradient algorithm for large-scale unconstrained optimization" [10], Liu Q.F., Chen Z., Yin W.Y. "An Arbitrary-Order LOD-FDTD Method and its stability and numerical dispersion" [29], în Lecture Notes in Mathematics, Fletcher, R. Watson, G. "Conjugate gradient methods for indefinite systems. Numerical Analysis" [97], în Van der Vorst, H.A. "Bi-CGSTAB: A Fast and Smoothly Converging Variant of Bi-CG for the Solution of Non symmetric Linear Systems" [17] și alte lucrări.*

Este necesar de diferențiat procesul iterativ extern, organizat pentru liniarizarea ecuațiilor sistemului fundamental și procesul iterativ intern, realizat pentru rezolvarea sistemului liniar obținut în cadrul iterației curente a ciclului extern.

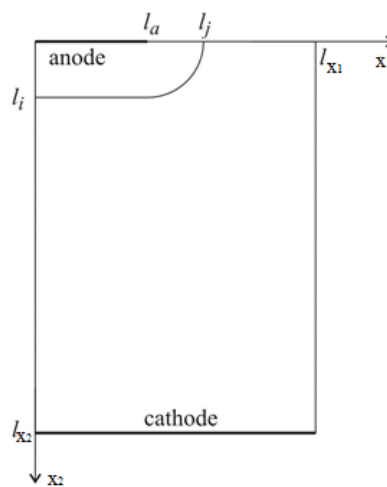
Există doi algoritmi ce diferă în esență, aplicabili la liniarizarea sistemului algebric neliniar pentru problema dispozitivului semiconductor, algoritmul lui Gummel și algoritmul lui Newton. La aplicarea algoritmului lui Newton ecuațiile sistemului fundamental sunt rezolvate concomitent, iar conform algoritmului lui Gummel ecuațiile sistemului sunt rezolvate consecutiv și în unele cazuri repetitiv, până când este atinsă exactitatea prestabilită a soluției. Descrierea algoritmului lui Gummel poate fi găsită în lucrările lui Gummel, H. K. "A self-consistent iterative scheme for one-dimensional steady state transistor calculation" [37], Farrell, P.A., Gartland, E.C. "On the Scharfetter-Gummel for Drift-Diffusion continuity equations" [36].

Algoritmul metodei lui Gummel, aplicat la liniarizarea ecuațiilor sistemului algebric neliniar, obținut în cadrul rezolvării problemei dispozitivului semiconductor, va fi descris succint în continuare. Inițial este rezolvată ecuația lui Poisson (1.12), în raport doar cu variabila potențialului electrostatic, celelalte două variabile, concentrațiile de electroni și goluri, sunt considerate constante cu valori calculate la iterația precedentă. După, este rezolvată ecuația intensității curentului pentru electroni (1.13) în raport doar cu variabila concentrației pentru electroni, celelalte două variabile, potențialul electrostatic și concentrația pentru goluri, sunt considerate constante cu valori calculate la iterația precedentă. Și ca ultim pas al iterației curente pentru ciclul extern, se rezolvă ecuația intensității curentului pentru goluri (1.14) în raport doar cu concentrația pentru goluri, celelalte două variabile, potențialul electrostatic și concentrația pentru electroni, sunt considerate constante cu valori calculate la iterația precedentă. Procesul iterativ extern

continuă până la atingerea unei exactități prestabilite pentru calcularea valorile funcțiilor necunoscute.

Punctul forte al algoritmului lui Gummel este că fiecare ecuație a sistemului (1.12)-(1.14) se rezolvă separat de celelalte. Astfel, se economisește memoria calculatorului, lipsa căreia este resimțită mai ales în cazul problemelor de dimensiuni mari. Cu toate acestea, procesul Gummel converge repede doar în cazuri când ecuațiile sunt slab dependente una de celelalte, condiție care are loc la o dopare slabă sau medie a semiconductorului.

Folosind teoria dispozitivelor semiconductoare în continuare va fi formulată problema dispozitivului semiconductor și anume a diodei semiconductoare cu estimarea parametrilor de intrare a acesteia.



**Figura 1.1 Geometria diodei semiconductoare**

Considerăm modelul diodei semiconductoare din Figura 1.1. Dioda constă din două regiuni cu diferite tipuri de dopare, zona golurilor (*zona de tip p*) având o concentrație dominantă ale golurilor și zona electronilor (*zona de tip n*), cu o concentrație dominantă ai electronilor. Electroful anod este conectat la *zona de tip p*, iar electroful catod este conectat la *zona de tip n*.

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

$$N(x) = (N_D^+ - N_A^-) m^{-3} \quad (1.16)$$

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



impurităților este determinată de dominația atomilor donatori ionizați (*semiconductor de tip n*).

Modelul matematic al diodei semiconductoare constă din ecuații ale fizicii dispozitivelor semiconductoare, care descriu comportarea statică și dinamică a concentrațiilor purtătorilor de sarcină în dispozitivul semiconductor, aflat sub influența câmpurilor externe ce determină abateri de la condițiile de echilibru termic. Modelarea matematică a proceselor neliniare în dioda semiconductoare presupune rezolvarea unui sistem de trei ecuații în derivate parțiale neliniare: ecuația lui Poisson și ecuațiile intensității curenților pentru electroni și goluri. La rezolvarea problemei diodei semiconductoare sunt folosite și soluții analitice ale sistemului.

În funcție de soluțiile analitice folosite problema proceselor neliniare în dioda semiconductoare poate fi formulată în mai multe variante. În teză sunt descrise trei varietăți ale sistemului de ecuații ce reprezintă formularea matematică a problemei dispozitivului semiconductor.

În continuare sunt prezentate ecuațiile în derivate parțiale neliniare ale sistemului ce reprezintă formularea matematică a problemei dispozitivului semiconductor.

*Ecuația lui Poisson*, prima ecuație a sistemului, este o ecuație generală a Electrostaticii și se referă nu numai la cazul materialelor semiconductoare. Ea este o ecuație fundamentală ce modelează relația dintre potențialul electrostatic și intensitatea câmpului electric, corespunzător densității de sarcină electrică din dispozitiv

$$-\nabla \cdot (\varepsilon \nabla \varphi) = q(p - n + N) \quad (1.17)$$

unde  $\varphi$  este potențialul electrostatic, iar  $n$  și  $p$  sunt concentrațiile de electroni și goluri liberi, respectiv.

*Ecuațiile de continuitate*, alte două ecuații ale sistemului, descriu variația concentrațiilor purtătorilor de sarcină datorită unor factori, ca de exemplu, generare de perechi electron-gol în urma acțiunii factorilor externi, sau generare-recombinare internă la prezența în semiconductor a curenților de conducție.

*Ecuația continuității pentru electroni*

$$-\nabla \cdot (J_n) = -q(RG_{SRH} + RG_{AUG}) \quad (1.18)$$

*Ecuația continuității pentru goluri*

$$\nabla \cdot (J_p) = -q(RG_{SRH} + RG_{AUG}) \quad (1.19)$$

Setul de ecuații (1.17)-(1.19) este sistemului ce descrie matematic funcționalitatea diodei semiconductoare.

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

Valorile ratelor de recombinare-generare ale perechilor electron-gol sunt estimate conform relațiilor

$$RG_{SRH}(n, p) = \frac{pn - n_i^2}{\tau_p(n + n_i) + \tau_n(p + n_i)}, \quad RG_{AUG}(n, p) = (pn - n_i^2)(C_n n + C_p p) \quad (1.20)$$

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

Domeniul de definiție al sistemului de ecuații (1.17)-(1.19) este notat prin  $\Omega = (0 < x_1 < l_{x_1}, 0 < x_2 < l_{x_2})$  cu frontiera  $\Gamma = \Gamma_D \cup \Gamma_N$ , unde  $\Gamma_D$  este porțiunea frontierei la care sunt conectați electrozii anod și catod (*linia mai pronunțată din Figura 1.1*), iar  $\Gamma_N$ , porțiunea rămasă a frontierei. Astfel, întreg domeniul de definiție a problemei diodei semiconductoare este notat  $\bar{\Omega} = \Omega \cup \Gamma$ .

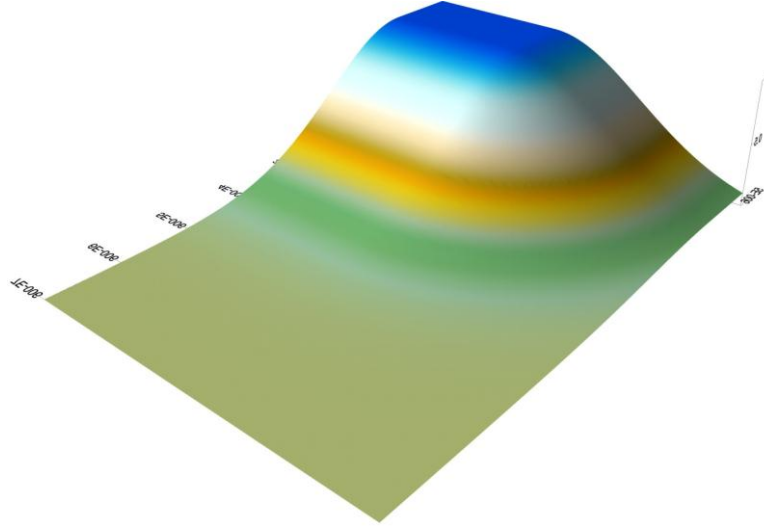
Concentrația de impurități  $N$  a semiconductorului, pe domeniul de definiție a problemei, poate fi estimată conform relației

$$N = N_{Dn} + N_{Dnmax} G(x_1, -x_2, \infty, l_{x_1}, \alpha) - N_{Apmax} G(x_1, x_2, l_a + l_{x_2}, l_{x_2}, \alpha) \quad (1.21)$$

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

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

$$G(x_1, x_2, a, b, \alpha) = \begin{cases} \exp\left[-\left(\frac{x_1 - a}{\alpha}\right)^2\right] \cdot \exp\left[-\left(\frac{x_2 - b}{\alpha}\right)^2\right], & x_1 > a \text{ \& } x_2 > b \\ \exp\left[-\left(\frac{x_1 - a}{\alpha}\right)^2\right], & x_1 > a \text{ \& } x_2 \leq b \\ \exp\left[-\left(\frac{x_2 - b}{\alpha}\right)^2\right], & x_1 \leq a \text{ \& } x_2 > b \\ 1, & x_1 \leq a \text{ and } x_2 \leq b \end{cases} \quad (1.22)$$



**Figura 1.2** Suprafața funcției Gauss  $G(x_1, x_2, a, b, \alpha)$  cu  $a = 3 \cdot 10^{-6}$ ,  $b = 1 \cdot 10^{-6}$ ,  $\alpha = 0.5 \cdot 10^{-6}$

Constantele din relațiile (1.21), (1.22), pe domeniul de definiere a problemei cercetării (Figura 1.1), au următoarele valori,  $N_{Dn} = 10^{16} m^{-3}$ ,  $N_{Dnmax} = 10^{18} m^{-3}$ ,  $N_{Apmax} = 10^{18} m^{-3}$ ;  $\alpha = 0.5 \cdot 10^{-6} m$ ,  $l_{x_1} = 5 \cdot 10^{-6} m$ ,  $l_{x_2} = 7 \cdot 10^{-6} m$ ,  $l_a = 2 \cdot 10^{-6} m$ ,  $l_i = l_j = 1 \cdot 10^{-6} m$ .

În primul caz, la formularea matematică a problemei diodei semiconductoare, ca soluții analitice ale sistemului de ecuații în derivate parțiale neliniare (1.17)-(1.19) au fost folosite densitățile de curenți pentru electroni și goluri.

În absența câmpului magnetic și a gradientului de temperatură, cauzele apariției curenților electrici pot fi aplicarea unui câmp electric sau existența gradientilor concentrațiilor purtătorilor de sarcină. Câmpul electric determină curenții de drift (de câmp), iar gradientii concentrațiilor purtătorilor de sarcină determină curenții de difuziune. Relațiile care definesc acești curenți se exprimă, de regulă, prin intermediul densităților de curenți pentru cele două categorii de purtători de sarcină, electroni și goluri.

*Ecuția densității de curent pentru electroni*

$$J_n = J_n \text{ drift} + J_n \text{ difuzie} = q n \mu_n \bar{E} + q D_n \nabla n \quad (1.23)$$

*Ecuția densității de curent pentru goluri*

$$J_p = J_p \text{ drift} + J_p \text{ difuzie} = q p \mu_p \bar{E} - q D_p \nabla p \quad (1.24)$$

aici  $\vec{E}$  este intensitatea câmpului electric ( $E = -\nabla\varphi$ ), iar mobilitățile purtătorilor de sarcină, cazul diodei confecționată din siliciu, au valorile  $\mu_n = 0,08 \text{ m}^2/(\text{V} \cdot \text{s})$  și  $\mu_p = 0,02 \text{ m}^2/(\text{V} \cdot \text{s})$  pentru electroni și goluri, respectiv.

Coeficienții difuziei  $D_n$  și  $D_p$  pentru electroni și goluri sunt în relații cu mobilitățile acestora  $\mu_n$  și  $\mu_p$  conform expresiilor lui Einstein

$$\frac{D_n}{\mu_n} = \frac{k_B T}{q} = \varphi_T, \quad \frac{D_p}{\mu_p} = \frac{k_B T}{q} = \varphi_T \quad (1.25)$$

O parte din parametrii acestor ecuații se obțin prin rezolvarea unor ecuații auxiliare.

Ecuațiile concentrațiilor purtătorilor de sarcină la neechilibru termodinamic pentru electroni și goluri, respectiv

$$n = n_i \exp\left(\frac{E_{F_n} - E_{F_i}}{kT}\right) \equiv n_i \exp\left(\frac{\varphi_i - \varphi_{F_n}}{kT/q}\right) \quad (1.26)$$

$$p = n_i \exp\left(\frac{E_{F_p} - E_{F_i}}{kT}\right) \equiv n_i \exp\left(\frac{\varphi_{F_p} - \varphi_i}{kT/q}\right) \quad (1.27)$$

unde  $E_{F_n}$  și  $E_{F_p}$  sunt cvasi-nivelele lui Fermi pentru electroni și goluri (semiconductor de tip n și de tip p, respectiv), iar  $\varphi_{F_n}$  și  $\varphi_{F_p}$  cvasi-potențialele lui Fermi pentru electroni și goluri, respectiv, diferența  $E_{F_n} - E_{F_p}$  fiind abaterea de la starea de echilibru termodinamic. La echilibru termodinamic este adevărată egalitatea

$$E_{F_n} = E_{F_p} = E_{F_i}. \quad (1.28)$$

În cazul doi, la formularea matematic a problemei diodei semiconductoare, ca soluții analitice pentru sistemul (1.17)-(1.19) sunt folosite densitățile de curent și cvasi-potențialele lui Fermi, pentru electroni și goluri.

*Ecuația densității de curent pentru electroni*

$$J_n = -qn\mu_n \nabla\varphi_n \quad (1.29)$$

*Ecuația densității de curent pentru goluri*

$$J_p = -qn\mu_p \nabla\varphi_p \quad (1.30)$$

*Ecuația cvasi-potențialul lui Fermi pentru electroni*

$$\varphi_n = \varphi - \varphi_T \ln\left(\frac{n}{n_i}\right) \quad (1.31)$$

*Ecuația cvasi-potențialului lui Fermi pentru goluri*

$$\varphi_p = \varphi - \varphi_T \ln\left(\frac{p}{n_i}\right) \quad (1.32)$$

În al treilea caz, la formularea matematic a problemei diodei semiconductoare, pentru sistemul (1.17)-(1.19) sunt folosite soluții analitice ale densităților de curenți, ale

concentrațiilor purtătorilor de sarcini și cele ale variabilelor lui Slotboom, pentru electroni și goluri.

*Ecuțiile densităților de curenți pentru electroni și goluri, respectiv*

$$J_n = qD_n n_i \exp\left(\frac{\varphi}{\varphi_T}\right) \nabla \rho_n \quad (1.33)$$

$$J_p = -qD_p n_i \exp\left(-\frac{\varphi}{\varphi_T}\right) \nabla \rho_p \quad (1.34)$$

*Ecuții ale concentrațiilor purtătorilor de sarcină pentru electroni și goluri, respectiv*

$$n = n_i \rho_n \exp\left(\frac{\varphi}{\varphi_T}\right) \quad (1.35)$$

$$p = n_i \rho_p \exp\left(-\frac{\varphi}{\varphi_T}\right) \quad (1.36)$$

*Ecuții ale variabilelor lui Slotboom pentru electroni și goluri, respectiv*

$$\rho_n = n_i \exp\left(-\frac{\varphi_n}{\varphi_T}\right) \quad (1.37)$$

$$\rho_p = n_i \exp\left(\frac{\varphi_p}{\varphi_T}\right) \quad (1.38)$$

Condițiile la frontieră pentru problema diodei semiconductoare sunt de două tipuri și acționează pe porțiuni disjuncte ale ei

- pe porțiunea de frontieră  $\Gamma_D$ , acționează *condițiile lui Dirichlet*

$$\varphi(\bar{x}) = V_a + \varphi_T \ln\left(\frac{N + \sqrt{N^2 + 4n_i^2}}{2n_i}\right); \quad n(\bar{x}) = \frac{N + \sqrt{N^2 + 4n_i^2}}{2}; \quad p(\bar{x}) = \frac{-N + \sqrt{N^2 + 4n_i^2}}{2}, \quad \bar{x} \in \Gamma_D. \quad (1.39)$$

- pe porțiunea de frontieră  $\Gamma_N$  acționează *condițiile lui Neumann*

$$\vec{n} \cdot \nabla \varphi = \frac{\partial \varphi}{\partial n} = 0; \quad \vec{n} \cdot J_n = 0; \quad \vec{n} \cdot J_p = 0, \quad \bar{x} \in \Gamma_N. \quad (1.40)$$

unde prin punct se înțelege produsul scalar al vectorului normal exterior  $\vec{n}$  pe porțiunea de frontieră  $\Gamma_N$  la *gradientul potențialului* electrostatic  $\varphi$  și la vectorii densităților de curenți pentru electroni  $J_n$  și goluri  $J_p$ .

S-a considerat catodul conectat la pământ ( $V_c = 0$ ), iar că la anod a fost aplicată o tensiune  $V_a > 0$ , cu mărirea treptată a ei.

În lipsa tensiunii aplicată la anod  $V_a = 0$ , soluția problemei dispozitivului semiconductor are forma (1.39) pe întreg domeniul de definiție  $\bar{\Omega}$  cu  $V_a = 0$ . Această soluție a fost folosită ca valoare inițială la rezolvarea problemei cu aplicarea metodelor iterative și mărirea treptată a tensiunii aplicată din exterior la anod  $V_a$ .

Astfel, la crearea algoritmilor numerici de modelare matematică a proceselor neliniare în dioda semiconductoare, în cadrul cercetării, au fost folosite două formulări matematice ale problemei:

- *Modelul matematic Drift-Diffusion (MDD)* cu tripletul de variabile  $\{\varphi, n, p\}$ , reprezentat de sistemul de ecuații în derivate parțiale neliniare (1.17)-(1.19), soluțiile analitice ale acestuia (1.26), (1.27), cu condițiile la frontieră (1.39), (1.40).

- *Modelul matematic Drift-Diffusion (MDD)* cu tripletul de variabile  $\{\varphi, \varphi_n, \varphi_p\}$ , reprezentat de sistemul de ecuații în derivate parțiale neliniare (1.17)-(1.19), soluțiile analitice ale acestuia (1.29)-(1.32), cu condițiile la frontieră (1.39), (1.40).

În ambele cazuri, modelarea matematică a proceselor neliniare în dioda semiconductoare a presupus rezolvarea unei probleme neliniare mixtă cu două tipuri de condiții la frontieră, ce acționează pe porțiuni disjuncte ale ei.

### 1.3 Concluzii la capitolul 1

Modelarea matematică a reprezentat și reprezintă o modalitate rapidă de progres în tehnologia microelectronică. Simularea proceselor tehnologice nu înlocuiește fabricarea, însă reduce considerabil numărul de încercări necesar pentru obținerea unui proces performant și stabil.

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, testarea, validarea lor și alegerea variantelor eficiente.

În simularea numerică o etapă importantă a fost cea de formulare matematic a problemei dispozitivului semiconductor. Asta deoarece modelul matematic trebuie să aproximeze sistemul real, folosind o reprezentare cât mai simplă și mai compactă, care nu include detalii inutile și nu omite nici unul dintre elementele importante.

Modelarea numerică poate fi realizată pe calculatoare de cele mai diverse tipuri, de la calculatoare personale până la supercalculatoare sau sisteme distribuite. Modelarea numerică este preponderentă, analistul având posibilitatea să aleagă dintr-o mare varietate de limbaje și programe pe cel mai potrivit scopului și posibilităților sale.

Programul destinat modelării numerice a unei anumite clase de modele poate fi scris fie într-un limbaj de programare de uz general (C, Pascal, FORTRAN etc.) utilizând eventual biblioteci special concepute, fie într-un limbaj de simulare (GPSS, SIMAN, ACSL, etc.). În cadrul acestei cercetări a fost folosit limbajul MATLAB pentru implementarea algoritmilor

de modelare matematică a dispozitivului semiconductor. MATLAB-ul este un limbaj de înaltă performanță pentru proiectarea asistată de calculator. Este în același timp un limbaj de programare și un sistem de dezvoltare care integrează calculul, vizualizarea și programarea într-un mediu ușor de utilizat. MATLAB este un sistem interactiv care are ca element de bază tabloul, matricea, ceea ce permite rezolvarea problemelor de calcul numeric. Domenii de utilizare a MATLAB-lui: 1) Matematica și calcul numeric; 2) Dezvoltarea algoritmilor; 3) Modelare, simulare și testare a prototipurilor; 3) Analiza și vizualizarea datelor; 3) Grafica inginerescă și din științele aplicate; etc.

Următoarele concluzii au servit ca repere în cadrul cercetării pentru elaborarea algoritmilor numerici și realizarea softurilor corespunzătoare, de modelare matematică a proceselor neliniare în dioda semiconductoare și identificarea celor eficienți:

- *Modelarea matematică a dispozitivului semiconductor* este metodologia experimentală și aplicativă, care se va concretiza prin efectuarea de experimente asupra modelelor numerice ale dispozitivului semiconductor din imposibilitatea de a o face în mod direct. Rezultatele obținute pe această cale vor permite factorilor de decizie să compare variante ale acestui sistem, să tragă concluzii cu privire la performanțele acestui sistem, la comportarea probabilă a acestuia și la eventualele abateri de la cea așteptată.

- *Modelarea matematică a proceselor neliniare în dispozitivul semiconductor* poate fi realizată efectiv deoarece fizica dispozitivelor semiconductoare este bine cunoscută, permițând folosirea modelelor fizice foarte bune. Modelul drift-diffusion este unul dintre modelele care descriu suficient problema cercetată și posibil de aplicat la etapa modelării fizico-matematice a dispozitivului semiconductor. În cadrul cercetării, au fost folosite două modele matematice ale dispozitivului semiconductor, sistemul de ecuații în derivate parțiale neliniare (1.17)-(1.19), (1.23), (1.24) cu setul de variabile  $\{\varphi, n, p\}$  și sistemul (1.17)-(1.19), (1.29)-(1.32) cu setul de variabile  $\{\varphi, \varphi_n, \varphi_p\}$ . Alegerea modelului matematic (1.17)-(1.19), (1.23), (1.24) este argumentată de forma explicită a sistemului în raport cu variabilele sistemului  $\{\varphi, n, p\}$ . Iar alegerea sistemului (1.17)-(1.19), (1.29)-(1.32) are ca principal argument simetria operatorului sistemului, astfel la rezolvarea acestuia au putut fi aplicate mai multe metode iterative, spre deosebire de cazul sistemului formulat cu ajutorul setului de variabile  $\{\varphi, n, p\}$ .

- Este necesar de a acorda atenție sporită acumulării de erori în procesul calculului numeric și de elaborat instrumente pentru înlăturarea sau neutralizarea efectului negativ care l-ar avea asupra exactității soluției, generat iterativ în procesul calculului.

- Alegerea metodei iterative pentru soluționarea sistemului algebric obținut se va face în baza criteriilor de aplicabilitate ale acestora și prin testări, deoarece nu există recomandări generale de aplicare a metodelor numerice la rezolvarea sistemelor de ecuații în derivate parțiale neliniare cu două tipuri de condiții la frontieră. Succesul soluționării lor depinde de preconditionarea reușită a acestora. Astfel o preconditionare reușită sau mai puțin reușită va putea fi stabilită doar prin testarea algoritmului de modelare numerică.

- Ca criterii de apreciere a eficienței algoritmilor elaborați pentru modelarea matematică a proceselor neliniare în dioda semiconductoare de ales un set care caracterizează suficient un algoritm numeric: măsoară viteza de convergență către soluția exactă, dimensiunea problemei, complexitatea algoritmului, etc.

Atât algoritmii elaborați, cât și softul corespunzător creat, și rezultatele testării lor au fost documentate, astfel ar putea servi ca suport pentru o viitoare cercetare și o mai bună înțelegere a rezultatelor de către utilizatori.



## 2 MODELAREA MATEMATICĂ A FUNCȚIONALITĂȚII DISPOZITIVULUI SEMICONDUCTOR PRIN POTENȚIALUL ELECTROSTATIC ȘI CVASI-POTENȚIALELE LUI FERMI

### 2.1 Scheme cu diferențe finite aplicate la discretizarea ecuațiilor în modelarea numerică

Dispozitivele fabricate din materiale semiconductoare sunt baza electronicii moderne. Dioda este una dintre aplicații ale semiconductoarelor. Funcționarea sa microscopică este asimilabilă cu cea a unui întrerupător, care lasă curentul să treacă doar într-un singur sens. Această proprietate o face larg aplicabilă în electronică. Este cea care va permite redresarea statică a curentului alternativ și intră în componența alimentatoarelor stabilizate, obligatorii în majoritatea montajelor electronice. Concluzionând, se poate spune că această componentă, dioda, stă la baza electronicii actuale și este o componentă fundamentală.

Dioda semiconductoare aduce avantaje extraordinare și în ceea ce privește costul, fiabilitatea, dimensiunea și simplitatea în utilizare.

Pentru uz general, diodele din siliciu sunt cele mai bune deoarece acestea sunt mai rezistente la deteriorarea din cauza căldurii atunci când sunt lipite, ele au o rezistență mai mică atunci când se află în conducție și au curenți de scurgere foarte mici atunci când se aplică o tensiune inversă.

Modelul matematic al funcționalității diodei semiconductoare din siliciu a fost descris în capitolul 1, cu utilizarea a trei varietăți ale tripletului de variabile. În acest capitol vor fi descriși algoritmi de modelare numerică a funcționalității diodei semiconductoare formulată matematic prin sistemul de ecuații în derivate parțiale neliniare (1.17)-(1.19), cu soluții analitice ale acestuia (1.29)-(1.32) și condițiile la frontieră (1.39), (1.40), având ca variabile sistemul de funcții  $\{\varphi, \varphi_n, \varphi_p\}$ , unde  $\varphi$  este potențialului electrostatic,  $\varphi_n$  cvasi-potențialul Fermi pentru electroni și  $\varphi_p$  cvasi-potențialul lui Fermi pentru goluri.

Problema (1.17)-(1.19) cu condițiile la frontieră (1.39) (1.40) este o problemă neliniară mixtă, având pe porțiunea de frontieră  $\Gamma_D$  definite condițiile lui Dirichlet, iar pe porțiunea de frontieră  $\Gamma_N$  definite condițiile lui Neumann.

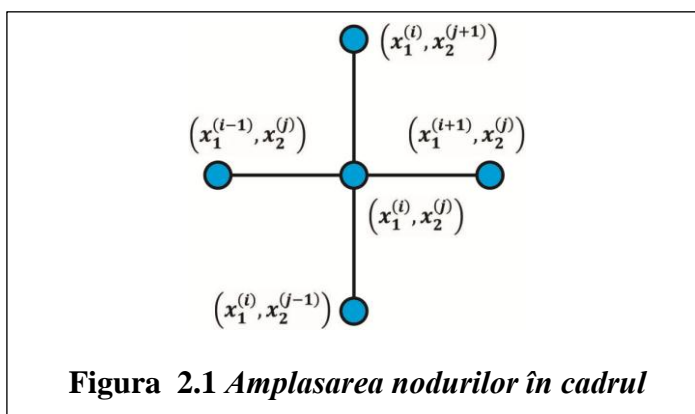
În lipsa tensiunii aplicată la anod  $V_a = 0$ , soluția problemei dispozitivului semiconductor are forma (1.39) pe întreg domeniul de definiție  $\bar{\Omega}$  cu  $V_a = 0$ . Această soluție a fost folosită ca valoare inițială la rezolvarea problemei cu aplicarea metodelor iterative și mărirea treptată a tensiunii aplicată din exterior la anod  $V_a$

O etapă importantă la crearea algoritmilor numerici pentru rezolvarea problemei (1.17)-(1.19) cu condițiile la frontieră (1.39) (1.40) a fost realizarea schemelor cu diferențe. Schemele cu diferențe sunt folosite pentru aproximarea problemelor matematice din fizică și sunt destinate pentru rezolvarea aproximativă a acestora.

La crearea unei scheme cu diferențe, ce aproximează o ecuație în derivate parțiale, au fost parcurși următorii doi pași: 1) Domeniul continuu de variație a argumentelor a fost înlocuit cu unul discret. 2) Operatorul diferențial a fost înlocuit cu unul discret și a fost formulat un analog pentru condițiile la frontieră și cele inițiale.

În teoria schemelor cu diferențe un domeniu esențial îl ocupă aproximarea ecuațiilor cu derivate parțiale prin diferențe finite și convergența schemelor obținute către soluțiile exacte ale ecuațiilor pe care le aproximează. Fiind creată, schema cu diferențe se transformă într-un obiect matematic independent, care poate fi studiat separat de ecuația inițială. Astfel, deced problemele ce țin de aproximarea și convergența soluției și rămâne doar problema de corectitudine a schemei cu diferențe.

Pe domeniul continuu de definiție (Figura 1.1) a problemei (1.17)-(1.19) cu condițiile la frontieră (1.39), (1.40) a fost introdusă o grilă cu pașii  $h_{x_1}$  și  $h_{x_2}$ . Astfel, a fost obținută rețeaua de noduri interne, notată prin  $\Omega_h = \{i = 2, \dots, NN, j = 2, \dots, MM\}$ , cu  $x_1^{(i)} = (i - 1) * h_{x_1}$  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  $\Omega_D$  este mulțimea nodurilor ce acoperă porțiunea de frontiera  $\Gamma_D$ , la care sunt conectați electrozii și pe care sunt definite condițiile lui Dirichlet, iar  $\Omega_N$  mulțimea de noduri ce acoperă porțiunea de frontieră rămasă  $\Gamma_N$  și pe care sunt definite condițiile lui Neumann.



La aproximarea ecuației diferențiale neliniare (1.17) cu diferențe finite, în nodurile interne ale rețelei ( $\Omega_h$ ), a fost obținut următorul sistem algebric (de dimensiunea  $(NN - 1) \times (MM - 1)$ )

$$2\varepsilon \left( \frac{1}{h_{x_1}^2} + \frac{1}{h_{x_2}^2} \right) \varphi_{ij} - \frac{\varepsilon}{h_{x_1}^2} (\varphi_{i+1,j} + \varphi_{i-1,j}) - \frac{\varepsilon}{h_{x_2}^2} (\varphi_{i,j+1} + \varphi_{i,j-1}) = q(p_{ij} - n_{ij} + N_{ij}) \quad (2.1)$$

cu  $i = \overline{2, NN}$   $j = \overline{2, MM}$ ,  $\varphi_{ij} = \varphi(x_1^{(i)}, x_2^{(j)})$ ,  $n_{ij} = n(x_1^{(i)}, x_2^{(j)})$ ,  $p_{ij} = p(x_1^{(i)}, x_2^{(j)})$ ,  $N_{ij} = N(x_1^{(i)}, x_2^{(j)})$ .

Pentru discretizarea ecuației în derivate parțiale neliniară (1.18) au fost parcurși următorii pași. Pentru început, au fost aplicate diferențele finite ecuației continuității pentru electroni (1.18), curenții pentru electroni au fost estimați în seminodurile rețelei, vecine nodului întreg  $(x_1^{(i)}, x_2^{(j)})$ , alte mărimi au fost estimate în nodurile întregi ale rețelei. Astfel s-a trecut la sistemul algebric

$$-\left( \frac{J_{ni+1/2,j} - J_{ni-1/2,j}}{h_{x_1}} + \frac{J_{ni,j+1/2} - J_{ni,j-1/2}}{h_{x_2}} \right) = -q(R_{SRH,ij} + R_{AUG,ij}), \quad i = \overline{2, NN} \quad j = \overline{2, MM} \quad (2.2)$$

După, utilizând ecuația curenților pentru electroni (1.29), au fost folosite următoarele expresii de estimare discretă ale intensităților pentru electroni în seminodurile rețelei

$$\begin{aligned} J_{ni-1/2,j} &= qn_{i-1/2,j} \mu_n \frac{\varphi_{nij} - \varphi_{ni-1,j}}{h_{x_1}}, & J_{ni+1/2,j} &= qn_{i+1/2,j} \mu_n \frac{\varphi_{ni+1,j} - \varphi_{nij}}{h_{x_1}} \\ J_{ni,j-1/2} &= qn_{i,j-1/2} \mu_n \frac{\varphi_{nij} - \varphi_{ni,j-1}}{h_{x_2}}, & J_{ni,j+1/2} &= qn_{i,j+1/2} \mu_n \frac{\varphi_{ni,j+1} - \varphi_{nij}}{h_{x_2}} \end{aligned} \quad (2.3)$$

aici, valorile discrete ale concentrației de electroni în seminodurile vecine nodului întreg  $(x_1^{(i)}, x_2^{(j)})$  au fost calculate conform relațiilor

$$\begin{aligned} n_{i-1/2,j} &= \frac{n_{ij} + n_{i-1,j}}{2} = \frac{n_i}{2} \left( \exp\left(\frac{\varphi_{ij} - \varphi_{nij}}{\varphi_T}\right) + \exp\left(\frac{\varphi_{i-1,j} - \varphi_{ni-1,j}}{\varphi_T}\right) \right) \\ n_{i+1/2,j} &= \frac{n_{ij} + n_{i+1,j}}{2} = \frac{n_i}{2} \left( \exp\left(\frac{\varphi_{ij} - \varphi_{nij}}{\varphi_T}\right) + \exp\left(\frac{\varphi_{i+1,j} - \varphi_{ni+1,j}}{\varphi_T}\right) \right) \\ n_{i,j-1/2} &= \frac{n_{ij} + n_{i,j-1}}{2} = \frac{n_i}{2} \left( \exp\left(\frac{\varphi_{ij} - \varphi_{nij}}{\varphi_T}\right) + \exp\left(\frac{\varphi_{i,j-1} - \varphi_{ni,j-1}}{\varphi_T}\right) \right) \\ n_{i,j+1/2} &= \frac{n_{ij} + n_{i,j+1}}{2} = \frac{n_i}{2} \left( \exp\left(\frac{\varphi_{ij} - \varphi_{nij}}{\varphi_T}\right) + \exp\left(\frac{\varphi_{i,j+1} - \varphi_{ni,j+1}}{\varphi_T}\right) \right) \end{aligned} \quad (2.4)$$

La înlocuirea (2.4) în (2.3) și (2.3) în (2.2) a fost obținut următorul sistem algebric neliniar de ordinul  $(NN - 1) \times (MM - 1)$

$$\begin{aligned} \mu_n \left( \frac{n_{i-1/2,j} + n_{i+1/2,j}}{h_{x_1}^2} + \frac{n_{i,j-1/2} + n_{i,j+1/2}}{h_{x_2}^2} \right) \varphi_{nij} - \frac{\mu_n}{h_{x_1}^2} n_{i+1/2,j} \varphi_{ni+1,j} - \frac{\mu_n}{h_{x_1}^2} n_{i-1/2,j} \varphi_{ni-1,j} - \\ \frac{\mu_n}{h_{x_2}^2} n_{i,j+1/2} \varphi_{ni,j+1} - \frac{\mu_n}{h_{x_2}^2} n_{i,j-1/2} \varphi_{ni,j-1} = R_{SRH,ij} + R_{AUG,ij}, \end{aligned} \quad (2.5)$$

Pentru discretizarea ecuației în derivate parțiale neliniare (1.19), pentru început, au fost aplicate diferențele finite, curenții pentru goluri fiind estimați în seminodurile rețelei, vecine

nodului curent  $(x_1^{(i)}, x_2^{(j)})$ , celelalte mărimi au fost estimate în nodurile întregi ale rețelei. Astfel s-a trecut la sistemul algebric

$$\left( \frac{J_{p_{i+1/2,j}} - J_{p_{i-1/2,j}}}{h_{x_1}} + \frac{J_{p_{i,j+1/2}} - J_{p_{i,j-1/2}}}{h_{x_2}} \right) = -q(R_{SRH,ij} + R_{AUG,ij}), \quad i = \overline{2, NN} \quad j = \overline{2, MM} \quad (2.6)$$

După, utilizând ecuația curenților pentru goluri (1.30), următoarele expresii au fost folosite pentru estimarea intensității golurilor în seminoduri

$$\begin{aligned} J_{p_{i-1/2,j}} &= qp_{i-1/2,j} \mu_p \frac{\varphi_{p_{ij}} - \varphi_{p_{i-1,j}}}{h_{x_1}}, & J_{p_{i+1/2,j}} &= qp_{i+1/2,j} \mu_p \frac{\varphi_{p_{i+1,j}} - \varphi_{p_{ij}}}{h_{x_1}} \\ J_{p_{i,j-1/2}} &= qp_{i,j-1/2} \mu_p \frac{\varphi_{p_{ij}} - \varphi_{p_{i,j-1}}}{h_{x_2}}, & J_{p_{i,j+1/2}} &= qp_{i,j+1/2} \mu_p \frac{\varphi_{p_{i,j+1}} - \varphi_{p_{ij}}}{h_{x_2}} \end{aligned} \quad (2.7)$$

cu valorile discrete ale concentrației de goluri în seminoduri estimate conform relațiilor

$$\begin{aligned} p_{i-1/2,j} &= \frac{p_{ij} + p_{i-1,j}}{2} = \frac{n_i}{2} \left( \exp\left(\frac{\varphi_{p_{ij}} - \varphi_{ij}}{\varphi_T}\right) + \exp\left(\frac{\varphi_{p_{i-1,j}} - \varphi_{i-1,j}}{\varphi_T}\right) \right) \\ p_{i+1/2,j} &= \frac{p_{ij} + p_{i+1,j}}{2} = \frac{n_i}{2} \left( \exp\left(\frac{\varphi_{p_{ij}} - \varphi_{ij}}{\varphi_T}\right) + \exp\left(\frac{\varphi_{p_{i+1,j}} - \varphi_{i+1,j}}{\varphi_T}\right) \right) \\ p_{i,j-1/2} &= \frac{p_{ij} + p_{i,j-1}}{2} = \frac{n_i}{2} \left( \exp\left(\frac{\varphi_{p_{ij}} - \varphi_{ij}}{\varphi_T}\right) + \exp\left(\frac{\varphi_{p_{i,j-1}} - \varphi_{i,j-1}}{\varphi_T}\right) \right) \\ p_{i,j+1/2} &= \frac{p_{ij} + p_{i,j+1}}{2} = \frac{n_i}{2} \left( \exp\left(\frac{\varphi_{p_{ij}} - \varphi_{ij}}{\varphi_T}\right) + \exp\left(\frac{\varphi_{p_{i,j+1}} - \varphi_{i,j+1}}{\varphi_T}\right) \right) \end{aligned} \quad (2.8)$$

Substituind (2.8) în (2.7) și (2.7) în (2.6) a fost obținut următorul sistem algebric nelinier de ordinul  $(NN - 1) \times (MM - 1)$

$$\begin{aligned} \mu_p \left( \frac{p_{i-1/2,j} + p_{i+1/2,j}}{h_{x_1}^2} + \frac{p_{i,j-1/2} + p_{i,j+1/2}}{h_{x_2}^2} \right) \varphi_{p,ij} - \frac{\mu_p}{h_{x_1}^2} p_{i+1/2,j} \varphi_{p,i+1j} - \frac{\mu_p}{h_{x_1}^2} p_{i-1/2,j} \varphi_{p,i-1j} - \\ \frac{\mu_p}{h_{x_2}^2} p_{i,j+1/2} \varphi_{p,i,j+1} - \frac{\mu_p}{h_{x_2}^2} p_{i,j-1/2} \varphi_{p,i,j-1} = -R_{SRH,ij} - R_{AUG,ij}, \end{aligned} \quad (2.9)$$

Discretizarea condițiilor la frontieră Dirichlet, în nodurile de pe porțiunea conectată la electrozi ( $\Gamma_D$ ), a fost realizată conform relațiilor (1.39) cu utilizarea soluțiilor analitice ale sistemului (1.22), (1.23). Astfel a fost obținut analogul condițiilor la frontieră pentru porțiunea de frontieră  $\Gamma_D$

$$\begin{aligned} \varphi_{ij} &= V_a + \varphi_T \ln \left( \frac{N_{ij} + \sqrt{N_{ij}^2 + 4n_i^2}}{2n_i} \right); & n_{ij} &= \frac{N_{ij} + \sqrt{N_{ij}^2 + 4n_i^2}}{2}; & p_{ij} &= \frac{-N_{ij} + \sqrt{N_{ij}^2 + 4n_i^2}}{2}; \\ \varphi_{n,ij} &= \varphi_{ij} - \varphi_T \ln \left( \frac{n_{ij}}{n_i} \right) & \varphi_{p,ij} &= \varphi_{ij} + \varphi_T \ln \left( \frac{n_{ij}}{n_i} \right), & \text{pentru } \Omega_D \end{aligned} \quad (2.10)$$

Analogii discreți ai condițiilor la frontieră Neumann (1.40), care acționează pe porțiunea de frontieră neconectată la electrozi ( $\Gamma_N$ ) în nodurile  $\Omega_N$ , au fost sistemele

$$\begin{cases} \varphi_{ij} = \varphi_{2j}, i = 1, j = \overline{1, MM + 1} \\ \varphi_{ij} = \varphi_{NNj}, i = NN + 1, j = \overline{1, MM + 1} \\ \varphi_{ij} = \varphi_{i2}, j = 1, i = \overline{1, NN + 1}, x_1^{(i)} > l_a \end{cases} \quad (2.11)$$

$$\begin{cases} \varphi_{nij} = \varphi_{n2j}, i = 1, j = \overline{1, MM + 1} \\ \varphi_{nij} = \varphi_{nNNj}, i = NN + 1, j = \overline{1, MM + 1} \\ \varphi_{nij} = \varphi_{ni2}, j = 1, i = \overline{1, NN + 1}, x_1^{(i)} > l_a \end{cases} \quad (2.12)$$

$$\begin{cases} \varphi_{pij} = \varphi_{p2j}, i = 1, j = \overline{1, MM + 1} \\ \varphi_{pij} = \varphi_{pNNj}, i = NN + 1, j = \overline{1, MM + 1} \\ \varphi_{pij} = \varphi_{pi2}, j = 1, i = \overline{1, NN + 1}, x_1^{(i)} > l_a \end{cases} \quad (2.13)$$

Ca etapă următoare, a algoritmilor de modelare numerică pentru problema (1.17)-(1.19) cu condițiile la frontieră (1.39), (1.40), după etapa de discretizare, a fost aplicarea metodelor iterative pentru rezolvarea sistemelor algebrice neliniare obținute (2.1), (2.5), (2.9).

Termenul "metodă iterativă" se referă la o gamă largă de tehnici, care utilizează aproximări succesive pentru a obține soluții cât mai precise ale unui sistem liniar.

Metodele iterative staționare (metode unde la fiecare iterație sunt efectuate aceleași operații cu vectorii de iterație curentă) sunt mai simplu de înțeles și implementat, dar în unele cazuri particulare nu sunt eficiente.

Metodele iterative nestaționare reprezintă o evoluție relativ recentă, sunt mai greu de ajustat la modelul matematic dat, implementarea lor poartă un caracter mai mult intuitiv, rezultatele implementării sunt testate prin comparație cu alți algoritmi, dar ele pot fi cele mai eficiente în cazuri mai particulare. Metodele nestaționare se bazează pe ideea de secvențe ale vectorilor ortogonali.

Rata de convergență a unei metode iterative depinde foarte mult de spectrul matricei de coeficienți. Prin urmare, metodele iterative implică, de obicei, trecerea la o altă matrice, care transformă echivalent matricea inițială a coeficienților în una cu un spectru mai favorabil, numită preconditionarea metodei. O preconditionare bună optimizează convergența metodei iterative suficient pentru a depăși costul suplimentar al construirii și aplicării preconditionării. Deseori, în calculele numerice fără o preconditionare bună metoda iterativă poate chiar să nu convergă.

Ecuțiile cu diferențe și condiții la frontieră corespunzătoare unor ecuații eliptice, cazul sistemului (1.17)-(1.19) cu condițiile la frontieră (1.39), (1.40), reprezintă sisteme algebrice speciale (rare, predominant diagonale) și pot fi tratate ca ecuații operatoriale de gradul întâi în spațiul Hilbert finit dimensional ( $H$ )

$$A u = f \quad (2.14)$$

unde  $A$  este operator definit în spațiul  $H$ ,  $u$  elementul căutat al acestui spațiu, iar  $f \in H$  elementul dat, definit de părțile drepte ale ecuațiilor sistemului algebric și de condițiile suplimentare.

Ecuțiile eliptice liniare sunt definite printr-un operatori liniar  $A$ , iar cele cvasi-liniare, printr-un operator neliniar.

Teoria metodelor iterative, în cazul ecuațiile operatoriale, este un compartiment din teoria schemelor cu diferențe ce ține de stabilitatea schemelor.

La aplicarea oricărei metode iterative se alege o aproximație inițială a soluției  $y_0 \in H$ , care generează continuu un șir de aproximări ale soluției  $y_1, y_2, \dots, y_k, y_{k+1}, \dots$ , șir ce converge către soluția exactă  $u$  a ecuației (2.14), unde  $k$  este numărul iterației. Aproximarea  $y_{k+1}$  poate fi obținută iterativ cu ajutorul aproximațiilor precedente conform relației  $y_{k+1} = F_k(y_0, y_1, y_2, \dots, y_k)$ , unde  $F_k$  este o funcție care depinde de operatorul  $A$ , de vectorul  $f$  și de numărul iterației  $k$ .

Metoda iterativă are ordinul  $m$  dacă fiecare aproximație a soluției este calculată în baza a  $m$  aproximații precedente, adică  $y_{k+1} = F_k(y_{k-m+1}, y_{k-m+2}, \dots, y_k)$ .

Schemele iterative de ordin superior necesită pentru realizarea lor memorizarea volumelor mari de date. În practică mai des sunt utilizate schemele de ordinul întâi și doi, care mai sunt numite scheme pe două nivele și pe trei nivele, corespunzător.

De funcția  $F_k$  depinde structura schemei cu diferențe, aplicată de metoda iterativă aleasă. Dacă funcția este liniară atunci și metoda iterativă se numește liniară. Dacă  $F_k$  nu depinde de numărul iterației atunci metoda iterativă se numește staționară, iar în caz contrar se numește nestaționară.

Orice schemă iterativă liniară poate fi scrisă sub forma

$$y_{k+1} = S_{k+1}y_k + \tau_{k+1}g_{k+1}, \quad k = 0, 1, \dots, \quad (2.15)$$

unde  $S_{k+1}$  este un operator liniar definit pe  $H$ , iar  $\tau_k$  sunt parametrii numerici ai schemei.

Condiția necesară de convergență a schemelor iterative (2.15) este ca soluția ecuației operatoriale (2.14)  $u = A^{-1}f \in H$  pentru orice funcție  $f$  să fie un punct fix al șirului de aproximații, obținut conform procesului iterativ (2.15). Adică

$$A^{-1}f = S_{k+1}A^{-1}f + \tau_{k+1}g_{k+1} \quad (2.16)$$

Astfel, dacă

$$S_{k+1} = E - \tau_{k+1}B_{k+1}^{-1}A \quad \text{iar} \quad g_{k+1} = B_{k+1}^{-1}f \quad (2.17)$$

unde  $B_{k+1}$  este un operator liniar inversabil definit în  $H$ , atunci condiția (2.16) este satisfăcută.

Substituind (2.17) în (2.15) se obține forma canonică a schemelor iterative implicite pe două nivele

$$B_{k+1} \frac{y_{k+1} - y_k}{\tau_{k+1}} + Ay_k = f, \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad y_0 \in H \quad (2.18)$$

Convergența schemei iterative (2.18) a fost studiată în spațiul energetic  $H_D$ , generat de operatorul simetric și pozitiv definit  $D$ , definit în spațiul  $H$ . Alegerea parametrilor iterativi  $\tau_{k+1}$  și a operatorilor  $B_{k+1}$  este preconditionată doar de convergența iterațiilor și minimumul de operații necesare pentru obținerea unei soluții cu o exactitate prestabilită.

Dacă  $B_{k+1} \equiv E$  atunci schema iterativă (2.18) se numește schemă explicită, în caz contrar implicită.

În cazul când parametrul  $\tau_{k+1}$  depinde de soluția estimată la iterația curentă  $y_{k+1}$  procesul va fi nestaționar. Evident, pentru procesul iterativ staționar  $B_{k+1}$  și  $\tau_{k+1}$  nu trebuie să depindă de  $y_{k+1}$ .

S-a presupus că operatorul  $A$  este liniar. Schema (2.18) poate fi folosită și în cazul unui operator neliniar. În acest caz operatorul  $B_{k+1}$  se alege, de obicei, liniar.

Pentru rezolvarea ecuației (2.14) pot fi folosite și scheme pe trei nivele. Cele mai studiate sunt schemele pe trei nivele standarde. Ele pot fi scrise sub forma

$$B_{k+1}y_{k+1} = \alpha_{k+1}(B_{k+1} - \tau_{k+1}A)y_k + (1 - \alpha_{k+1})B_{k+1}y_{k-1} + \alpha_{k+1}\tau_{k+1}f, \quad k = 1, 2, \dots \quad (2.19)$$

aici sunt folosite șirurile de parametri iterativi  $\{\tau_k\}$  și  $\{\alpha_k\}$ .

Pentru realizarea schemei iterative (2.19) pe lângă aproximația inițială  $y_0$  mai este necesară aproximația inițială  $y_1$  care se calculează, de obicei, cu ajutorul unei scheme pe două nivele (2.18), adică

$$B_1y_1 = (B_1 - \tau_1A)y_0 + \tau_1f, \quad y_0 \in H \quad (2.20)$$

În cazul schemei explicite cu  $B_{k+1} \equiv E$ ,  $k = 1, 2, \dots$ , (2.19) poate fi rescrisă sub forma

$$y_{k+1} = \alpha_{k+1}(E - \tau_{k+1}A)y_k + (1 - \alpha_{k+1})y_{k-1} + \alpha_{k+1}\tau_{k+1}f \quad (2.21)$$

O metodă iterativă este caracterizată de structura schemei iterative, de spațiul energetic  $H_D$  în care este studiată convergența metodei, de tipul metodei, de condiția ce stopează procesul iterativ, de algoritmul realizării unei iterații.

La crearea algoritmilor modelării numerice a proceselor în dispozitivele semiconductoare au fost aplicate schemele pe două și trei nivele, implicite sau explicite.

În cazul metodelor iterative staționare, parametrii schemei pe două nivele (2.18)  $\tau_k$ , iar pentru cazul schemei pe trei nivele (2.19), (2.20)  $\tau_k$  și  $\alpha_k$  au fost aleși din condiția minimumului pentru norma operatorului rezolvabil (operatorul trecerii de la iterația inițială la cea finală), sau pentru norma operatorului trecerii la iterația următoare. La alegerea parametrilor iterativi se ține

cont și de faptul ca aceștia să asigure viteza cea mai mare de convergență pentru orice aproximație inițială.

Pentru cazul metodelor iterative nestaționare parametrii au fost aleși din condiția minimului pentru funcționale legate de ecuația diferențială inițială. Ca exemplu, în calitate de funcțională poate fi luată norma energetică a erorii la iterați  $k$ . În acest caz parametrii iterativi depind de iterațiile precedente și de alegerea aproximației inițiale.

Teoria generală a metodelor iterative permite descrierea principiilor de bază pentru construirea metodelor optimale, în dependență de tipul și forma informației apriori despre problemă și în dependență de cerințele care sunt înaintate față de metoda de rezolvare a acesteia.

În caz de respectare a structurii operatorului asociat sistemului algebric ce trebuie rezolvat sunt create metodele iterative speciale, care au o viteză de convergență mai mare decât cele din teoria generală. Acestea se obține prin alegerea specială a operatorului  $B_{k+1}$  și a parametrilor iterativi. Metodele speciale au un domeniu îngust de aplicare, dar asigură o mai mare eficiență în cazuri mai particulare.

Pentru construirea metodelor iterative implicite operatorul  $B_{k+1}$  se alege sub o formă explicită sau aproximarea  $y_{k+1}$  este determinat printr-o procedură iterativă suplimentară, care poate fi considerată ca o transformare implicită a operatorului  $B_{k+1}$ .

Una dintre modalitățile alegerii operatorului  $B_{k+1}$  se bazează pe forma factorială a lui. Astfel  $B_{k+1} = B_{k+1}^1 * B_{k+1}^2 * \dots * B_{k+1}^p$ , iar  $y_{k+1}$  este determinat conform unei scheme pe două nivele (2.18). Sunt rezolvate ecuațiile următoarei consecutivități

$$B_{k+1}^1 v^1 = F_{k+1}, \quad B_{k+1}^\alpha v^\alpha = v^{\alpha-1}, \quad \alpha = 2, 3, \dots, p \quad (2.22)$$

unde  $F_{k+1} = -\tau_{k+1}(Ay_k - f)$ , evident că  $y_{k+1} = v^p$ .

Este recomandabilă forma factorială de căutare a operatorului  $B_{k+1}$ , atunci când fiecare dintre ecuațiile (2.22) este ușor rezolvabilă. Algoritmul nu necesită memorizarea informației intermediare deoarece de îndată ce este calculată aproximația soluției este și utilizată. Neajunsul acestui algoritm este că calcularea elementului  $B_{k+1} * y_k$ , poate fi un proces destul de complicat.

Al doilea algoritm de căutare a operatorului  $B_{k+1}$  are forma unei scheme cu redirectionări

$$y_{k+1} = y_k - \tau_{k+1} v^p \quad B_{k+1}^1 v^1 = Ay_k - f, \quad B_{k+1}^\alpha v^\alpha = v^{\alpha-1}, \quad \alpha = 2, 3, \dots, p \quad (2.23)$$

În acest caz este necesar de a memoriza aproximația soluției de la iterația precedentă  $y_k$ , până când nu este calculat reziduul  $v^p$ . Acest mod de construire a schemei iterativă și implicită presupune utilizarea schemei pentru reziduul din formula (2.23), unde  $v^p$  este determinat din ecuația

$$R_{k+1} v = r_k, \quad r_k = Ay_k - f \quad (2.24)$$



Eroarea obținută  $z^m = v^m - v$  satisface ecuația omogenă  $z^{m+1} = S_{m+1} * z^m$ ,  $m = 0, 1, 2, \dots, p-1$   $z^0 = v^0 - v$ , unde  $S_{m+1}$  este operatorul de trecere de la iterația  $m$  la iterația  $m+1$ .

Astfel,  $z^p = v^p - v = S_p S_{p-1} \dots S_1$ , cu  $z^0 = T_p(v^0 - v)$ . Operatorul  $T_p = \prod_{m=1}^p S_m$ , este numit operatorul rezolvabil (operator al trecerii de la iterația inițială la cea finală).

Substituind  $v = R_{k+1}^{-1} r_k$  cu  $v^0 = 0$  obținem  $v^p = (E - T_p) R_{k+1}^{-1} r_k$  sau

$$v^p = B_{k+1}^{-1} r_k \quad (2.25)$$

Cu cât norma operatorului rezolvabil  $T_p$  este mai mică cu atât mai exact operatorul  $B_{k+1}^{-1}$  aproximează operatorul  $R_{k+1}^{-1}$ . Astfel, în calitate de  $R_{k+1}^{-1}$  se alege un operator "apropiat", de operatorul  $A$  (în sensul echivalenței acestora).

## 2.2 Algoritmul modelării numerice a proceselor neliniare în dispozitivul semiconductor cu aplicarea Metodei Iterațiilor Simple (MIS)

Dacă în schema iterativă implicită pe două nivele (2.18)  $\tau_{k+1} = \tau_k$ ,  $k = 1, 2, \dots$ , adică este o constantă ce nu depinde de iterația metodei, atunci metoda se numește schema Metodei Iterațiilor Simple

$$B_{k+1} \frac{y_{k+1} - y_k}{\tau} + A y_k = f \quad (2.26)$$

unde  $y_k$  este aproximația soluției la iterația precedentă,  $y_{k+1}$  aproximația soluției la iterația curentă,  $\tau \neq 0$  este o constantă, numită parametrul metodei.

În cazul schemei explicite ( $B_{k+1} \equiv E$ ), expresia de calcul a soluției la iterația curentă este

$$y_{k+1} = -\tau (A y_k - f) + y_k = -\tau r_k + y_k, \quad (2.27)$$

unde  $r_k$  reziduul metodei ( $r_k = A y_k - f$ ) la iterația  $k$ .

*Teorema 2.1 Dacă operatorul  $A$  pentru un sistem algebric dat este simetric și pozitiv definit, iar parametrul  $\tau$  aparține intervalului  $(0, \lambda_{max})$ , unde  $\lambda_{max}$  valoarea proprie maximală a matricei  $A$ , atunci Metoda Iterațiilor Simple este convergentă către soluția exactă a sistemului algebric.*

Este demonstrat că  $\tau^{opt} = \frac{2}{\lambda_{max} + \lambda_{min}}$ , cu  $\lambda_{max}$  și  $\lambda_{min}$  valorile proprii ale operatorului  $A$  maximală și minimală, respectiv, este parametrul optimal al MIS [6].

La prima etapă, din cadrul algoritmului modelării numerice a funcționalității diodei semiconductoare cu aplicarea MIS, au fost discretizate ecuațiile sistemului (1.17)-(1.19) astfel trecând la sistemul algebric neliniar (2.1), (2.5), (2.9). Au fost calculate valorile inițiale ale

funcțiilor necunoscute conform relațiilor (2.10) pe întreg domeniul de definiție  $\bar{\Omega}$  și notate cu  $\varphi^{(0)}$ ,  $\varphi_n^{(0)}$ ,  $\varphi_p^{(0)}$ .

La următoarea etapă a fost organizat un ciclu extern în cadrul căruia, la fiecare iterație, cu pași mici, tensiunea aplicată la anod a fost mărită, iar valorile funcțiilor necunoscute au fost recalculat în condițiile echilibrului termodinamic și notate prin  $\varphi^{(m+1)}$ ,  $\varphi_n^{(m+1)}$ ,  $\varphi_p^{(m+1)}$ , unde  $(m + 1)$  iterația curentă a ciclului extern.

În cadrul ciclului extern a fost organizat ciclul de rezolvare a sistemului algebric neliniar (2.1), (2.5), (2.9) având ordinul  $(3 * NN) \times (3 * MM)$ , cu condițiile la frontieră (2.10)-(2.13). Valorile inițiale ale funcțiilor necunoscute, în cadrul acestui ciclu, sunt egalate cu valorile curente ale ciclului extern  $\varphi^{(n+1)} = \varphi^{(m+1)}$ ,  $\varphi_n^{(n+1)} = \varphi_n^{(m+1)}$ ,  $\varphi_p^{(n+1)} = \varphi_p^{(m+1)}$ , unde  $(n + 1)$  iterația curentă a ciclului cu  $n = 0$ .

În cadrul ciclului de rezolvare a sistemului algebric neliniar de ordinul  $(3 * NN) \times (3 * MM)$  au fost organizate trei cicluri interne consecutive pentru rezolvarea a câte un sistem algebric liniar de ordinul  $(NN - 1) \times (MM - 1)$ . Valorile inițiale ale funcțiilor necunoscute, pentru fiecare ciclu intern, au fost egalate cu valorile curente ale ciclului ce le include  $\varphi^{(k+1)} = \varphi^{(n+1)}$ ,  $\varphi_n^{(k+1)} = \varphi_n^{(n+1)}$ ,  $\varphi_p^{(k+1)} = \varphi_p^{(n+1)}$ , unde  $(k + 1)$  iterația curentă a ciclului intern cu  $k = 0$ , iar  $(n + 1)$  iterația curentă al ciclului superior pentru rezolvarea sistemului de ordinul  $(3 * NN) \times (3 * MM)$ .

Sistemului algebric neliniar (2.1) i-a fost aplicată schema MIS pe două nivele (2.27), iar mai apoi ideea algoritmului lui Gummel pentru liniarizarea lui și separarea de sistemele (2.5) și (2.9). Ca necunoscută a rămas doar potențialul electrostatic ( $\varphi$ ), iar cvasi-potențialul Fermi pentru electroni ( $\varphi_n$ ) și cvasi-potențialul Fermi pentru goluri ( $\varphi_p$ ) au fost luate ca constante, cu valori calculate la iterația precedentă. Astfel a fost obținut un sistem algebric liniar în necunoscuta potențialului electrostatic ( $\varphi$ ), de ordinul  $(NN - 1) \times (MM - 1)$ . Estimarea potențialului electrostatic ( $\varphi$ ) la iterația curentă  $(k + 1)$  în nodurile interne ale rețelei ( $\Omega_h$ ) a fost realizată conform sistemului

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

$$\text{cu } n_{ij}^{(k)} = n_i \exp\left(\frac{\varphi_{ij}^{(k)} - \varphi_{n,ij}^{(k)}}{\varphi_T}\right) \text{ și } p_{ij}^{(k)} = n_i \exp\left(\frac{\varphi_{p,ij}^{(k)} - \varphi_{ij}^{(k)}}{\varphi_T}\right), \text{ pe } \Omega_h \quad (2.28)$$

Valoarea curentă a potențialului electrostatic ( $\varphi^{(k+1)}$ ) a fost calculată iterativ, în cadrul ciclului intern, până la atingerea unei exactități prestabilite.

La ieșirea din ciclul intern (2.28) au fost calculate valorile curente ale potențialului electrostatic ( $\varphi^{(k+1)}$ ) în nodurile de pe frontieră conform relațiilor (2.11), iar valoarea curentă a potențialului electrostatic din cadrul ciclului superior ( $\varphi^{(n+1)}$ ) a fost egalată cu valoarea curentă a ciclului intern  $\varphi^{(n+1)} = \varphi^{(k+1)}$ .

Sistemului algebric neliniar (2.5) i-a fost aplicată schema MIS pe două nivele (2.27), iar mai apoi ideea algoritmului lui Gummel pentru liniarizarea lui și separarea de sistemele (2.1) și (2.9). Ca necunoscută a rămas doar cvasi-potențialul Fermi pentru electroni ( $\varphi_n$ ), iar potențialul electrostatic ( $\varphi$ ) și cvasi-potențialul Fermi pentru goluri ( $\varphi_p$ ) au fost luate ca constante cu valori calculate la iterația precedentă. Astfel a fost obținut un sistem algebric liniar în necunoscuta cvasi-potențialului Fermi pentru electroni ( $\varphi_n$ ) de ordinul  $(NN - 1) \times (MM - 1)$ . Estimarea cvasi-potențialului lui Fermi pentru electroni ( $\varphi_n$ ), la iterația curentă ( $k + 1$ ), în nodurile interne ale rețelei ( $\Omega_h$ ) a fost realizată conform sistemului

$$\varphi_{n,ij}^{(k+1)} = \frac{\left[ \frac{\mu_n}{h_{x_1}^2} n_{i+1/2,j}^{(k)} \varphi_{n,i+1,j}^{(k)} + \frac{\mu_n}{h_{x_1}^2} n_{i-1/2,j}^{(k)} \varphi_{n,i-1,j}^{(k)} + \frac{\mu_n}{h_{x_2}^2} n_{i,j+1/2}^{(k)} \varphi_{n,i,j+1}^{(k)} + \frac{\mu_n}{h_{x_2}^2} n_{i,j-1/2}^{(k)} \varphi_{n,i,j-1}^{(k)} + R_{SRH,ij}^{(k)} + R_{AUG,ij}^{(k)} \right]}{\left[ \mu_n \left( \frac{n_{i-1/2,j}^{(k)} + n_{i+1/2,j}^{(k)}}{h_{x_1}^2} + \frac{n_{i,j-1/2}^{(k)} + n_{i,j+1/2}^{(k)}}{h_{x_2}^2} \right) \right]}, \quad (2.29)$$

cu  $n_{i+1/2,j}^{(k)}$ ,  $n_{i-1/2,j}^{(k)}$ ,  $n_{i,j+1/2}^{(k)}$ ,  $n_{i,j-1/2}^{(k)}$ , calculate în seminodurile interne ale rețelei conform relațiilor (2.4).

Valoarea curentă a cvasi-potențialului Fermi pentru electroni ( $\varphi_n^{(k+1)}$ ) a fost calculată iterativ, în cadrul ciclului intern, până la atingerea unei exactități prestabilite.

La ieșirea din ciclul intern (2.29) au fost calculate valorile curente ale cvasi-potențialului Fermi pentru electroni ( $\varphi_n^{(k+1)}$ ) în nodurile de pe frontieră, conform relațiilor (2.12), iar valoarea curentă a cvasi-potențialului Fermi pentru electroni din cadrul ciclului superior ( $\varphi_n^{(n+1)}$ ) a fost egalată cu valoarea curentă a ciclului intern  $\varphi_n^{(n+1)} = \varphi_n^{(k+1)}$ .

Sistemului algebric neliniar (2.9) i-a fost aplicată schema MIS pe două nivele (2.27), iar mai apoi ideea algoritmului lui Gummel, pentru liniarizarea lui și separarea de sistemele (2.1) și (2.5). Ca necunoscută a rămas doar cvasi-potențialul Fermi pentru goluri ( $\varphi_p$ ), iar potențialul electrostatic ( $\varphi$ ) și cvasi-potențialul Fermi pentru electroni ( $\varphi_n$ ) au fost luate ca constante, cu valori calculate la iterația precedentă. Astfel a fost obținut un sistem algebric liniar în necunoscuta cvasi-potențialului Fermi pentru goluri ( $\varphi_p$ ) de ordinul  $(NN - 1) \times (MM - 1)$ . Estimarea cvasi-potențialului Fermi pentru goluri ( $\varphi_p$ ), la iterația curentă ( $k + 1$ ), în nodurile interne ale rețelei ( $\Omega_h$ ) a fost realizată conform sistemului

$$\varphi_{p,ij}^{(k+1)} = \frac{\left[ \frac{\mu_p}{h_{x_1}^2} p_{i+1/2,j}^{(k)} \varphi_{p,i+1,j}^{(k)} + \frac{\mu_p}{h_{x_1}^2} p_{i-1/2,j}^{(k)} \varphi_{p,i-1,j}^{(k)} + \frac{\mu_p}{h_{x_2}^2} p_{i,j+1/2}^{(k)} \varphi_{p,i,j+1}^{(k)} + \frac{\mu_p}{h_{x_2}^2} p_{i,j-1/2}^{(k)} \varphi_{p,i,j-1}^{(k)} - R_{SRH,ij}^{(k)} - R_{AUG,ij}^{(k)} \right]}{\left[ \mu_p \left( \frac{p_{i+1/2,j}^{(k)} + p_{i-1/2,j}^{(k)}}{h_{x_1}^2} + \frac{p_{i,j+1/2}^{(k)} + p_{i,j-1/2}^{(k)}}{h_{x_2}^2} \right) \right]}, \quad (2.30)$$

cu  $p_{i+1/2,j}^{(k)}$ ,  $p_{i-1/2,j}^{(k+1)}$ ,  $p_{i,j+1/2}^{(k)}$ ,  $p_{i,j-1/2}^{(k+1)}$ , calculate în seminodurile interne ale rețelei conform relațiilor (2.8).

Valoarea curentă a cvasi-potențialului Fermi pentru goluri ( $\varphi_p^{(k+1)}$ ) a fost calculată iterativ, în cadrul ciclului intern, până la atingerea unei exactități prestabilite.

La ieșirea din ciclul intern (2.30) au fost calculate valorile curente ale cvasi-potențialului Fermi pentru goluri ( $\varphi_p^{(k+1)}$ ) în nodurile de pe frontieră, conform relațiilor (2.13), iar valoarea curentă a cvasi-potențialului Fermi pentru goluri din cadrul ciclului superior ( $\varphi_p^{(n+1)}$ ) a fost egalată cu valoarea curentă a ciclului intern  $\varphi_p^{(n+1)} = \varphi_p^{(k+1)}$ .

Ciclul de rezolvare a sistemului algebric neliniar (2.1), (2.5), (2.9) de ordinul  $((3 * NN) \times (3 * MM))$  s-a desfășurat până a fost atinsă exactitatea prestabilă pentru calcularea soluției sistemului algebric  $\{\varphi^{(n+1)}, \varphi_n^{(n+1)}, \varphi_p^{(n+1)}\}$ .

La ieșirea din acest ciclu s-a trecut la următoarea iterație a ciclului extern în cadrul căreia valorile externe ale funcțiilor necunoscute au fost modificate  $\varphi^{(m+1)} = \varphi^{(n+1)}$ ,  $\varphi_n^{(m+1)} = \varphi_n^{(n+1)}$ ,  $\varphi_p^{(m+1)} = \varphi_p^{(n+1)}$ , cu  $(m + 1)$  iterația curentă a ciclului extern. În cadrul aceleiași iterații externe a fost mărită tensiunea aplicată la anod  $V_a$  și recalculat valorile variabilelor  $\{\varphi^{(m+1)}, \varphi_n^{(m+1)}, \varphi_p^{(m+1)}\}$  în condițiile echilibrului termodinamic. Procesul iterativ extern a rulat până când  $V_a$  depășește valoarea 0,2 A.

A fost stabilită complexitatea algoritmului modelării numerice a proceselor neliniare în dispozitivul semiconductor cu aplicarea MIS, teoretic. Analizând schema MIS (2.27) s-a constatat că pentru realizarea ei se efectuează o operație de înmulțire a matricei la un vector și trei operații aritmetice asupra vectorilor (două scăderi și o înmulțire la scalar). Dacă notăm prin  $nn \times nn$  ordinul matricei  $A$  și luând în calcul că este o matrice predominant cinci diagonală, numărul total de operații la o iterație a fost calculat în baza următoarelor componente  $t_0 = 5nn$  ca număr de operații scalare necesare pentru calcularea valorilor inițiale,  $t_1 = 6nn$  numărul de adunări/scăderi ale scalarilor la realizarea unei iterații interne,  $t_2 = 6nn$  numărul de înmulțiri/împărțiri ale scalarilor la realizarea unei iterații interne.

Numărul minim de iterații necesar  $k_0$ , estimat teoretic în cazul MIS, pentru determinarea soluției cu exactitatea prestabilită este

$$k_0(\text{eroarea}) = \ln(\text{eroare})/\ln(\rho) \approx 0,2 NM^2 \ln \frac{1}{\text{eroare}} \quad (2.31)$$

unde  $NM$  este numărul de noduri ale rețelei pe o direcție,  $\rho$  viteza de convergență a metodei. Astfel, numărul minim de iterații este proporțional cu pătratul numărului de noduri pe o direcție, de unde rezultă că este proporțională cu numărul de necunoscute ale sistemului algebric.

Numărul total de operații, necesar pentru calcularea soluției sistemului (2.1), (2.5), (2.9), este  $T = 36 * nn * k_0 + 5 * nn$  operații.

Conform teoriei, viteza de convergență a metodei iterative  $\rho$  în cazul MIS

$$\rho = \frac{1-\xi}{1+\xi}, \text{ cu } \xi = \frac{\gamma_1}{\gamma_2}, \gamma_1 = \sum_{i=1}^2 \frac{4}{h_i^2} \cos^2 \frac{\pi h_i}{2l_i}, \gamma_2 = \sum_{i=1}^2 \frac{4}{h_i^2} \sin^2 \frac{\pi h_i}{2l_i} \quad (2.32)$$

unde  $h_i$  este pasul rețele,  $\gamma_1$  și  $\gamma_2$  valorile proprii ale lui  $A$  maximală și minimală, respectiv.

Ordinul de convergență al algoritmului cu aplicarea MIS, estimat teoretic, este

$$\mathcal{O}(h_i^2) \quad (2.33)$$

Rezultate numerice obținute în urma experimentelor asupra modelului numeric al diodei semiconductoare cu utilizarea MIS

a) Tabelul numărului mediu de iterații, efectuate pentru calculării soluțiilor cu exactitatea prestabilită de ordinul  $10^{-10}$ , obținut în urma măsurărilor experimentale asupra algoritmului numeric ce modelează matematic procesele neliniare în dioda semiconductoare (cazul MIS), implementat pe o rețea de noduri ( $16 \times 32$ ):

**Tabel 2.1: Numărul mediu de iterații. Cazul tripletului de necunoscute  $\{\varphi, \varphi_n$  și  $\varphi_p\}$  cu aplicarea MIS.**

nr. de iterații interne, pentru $\varphi$	nr. de iterații interne, pentru $\varphi_n$	nr. de iterații interne, pentru $\varphi_p$	nr. total de iterații	iterații externe	durata, (minute)
12195	5786366	5883328	11681889	2455	2460

b) Suprafețele funcțiilor  $\varphi$ ,  $\varphi_n$  și  $\varphi_p$ , construite în baza rezultatelor experimentale, obținute la rezolvarea problemei diodei semiconductoare cu utilizarea MIS, sunt prezentate în *Anexa 1*.

Dependența într-o mare măsură a MIS de pasul rețelei duce la o convergență lentă a metodei către soluția exactă. Punctul forte al metodei este că converge pentru orice aproximare inițială și informațiile apriori ale operatorului nu includ condiția de simetrie a operatorului sistemului algebric.

### 2.3 Algoritmul modelării numerice a proceselor neliniare în dispozitivul semiconductor cu aplicarea Metodelor Iterative Triunghiulare (MIT)

În teoria generală a metodelor iterative eficacitatea metodei aplicate depinde mult de proprietățile operatorului schemei folosite. A nu studia și această direcție înseamnă a comite o scăpare în cercetare. De proprietățile operatorului schemei depinde numărul iterațiilor necesare pentru calcularea soluției cu o exactitate prestabilită. Numărul de iterații depinde de mărimea  $\xi = \frac{\gamma_1}{\gamma_2}$ , unde  $\gamma_1$ ,  $\gamma_2$  sunt *constantele echivalenței energetice* ale operatorilor  $A$  și  $B$  din schema pe două nivele (2.18), pentru care are loc relația  $\gamma_1 B \leq A \leq \gamma_2 B$ .

Dacă alegem  $B \equiv A$ , obținând  $\xi = 1$ , numărul iterațiilor va fi minimal, astfel soluția exactă se va obține la o singură iterație pentru orice aproximare inițială. Dar pentru a realiza această iterație este necesar de a determina inversa matricei  $A$ , care în cazul problemei cercetate are ordinul foarte mare, ceea ce ar duce la creșterea fabuloasă a numărului de operații necesare. Și invers, cazul metodelor explicite  $B \equiv E$ , sunt necesare un număr minim de operații pentru realizarea unei iterație, dar în schimb crește numărul de iterații.

Idea a fost de a căuta acel mijloc, adică varianta optimală între variantele expuse mai sus. Iar aceasta a însemnat căutarea variantei optimale pentru operatorul  $B$ , conform criteriului de minimizare a volumului de calcule numerice pentru calcularea soluției cu o exactitate prestabilită.

Un indicator de a găsi varianta optimală a operatorului  $B$  a fost căutarea unui operator ușor inversabil. Iar un indicator al inversabilității este mărimea  $\xi = \frac{\gamma_1}{\gamma_2}$  cu cea mai bună valoare (optimală).

La categoria operatorilor ușor inversabili și economi sunt atribuiți și operatorii pentru inversarea cărora este necesar un număr de operații proporțional sau aproximativ proporțional cu numărul de necunoscute.

Exemple de operatori ușor inversabili sunt operatori ale căror matrici au forma diagonală, trei-diagonală, triunghiulară sau produsul acestora.

Este de menționat că utilizarea în calitate de operator  $B$  a operatorilor diagonali, în comparație cu schema explicită, este mai optimală deoarece duce la micșorarea numărului de iterații, dependența exponențială (asimptotică) a numărului de iterații față de numărul de necunoscute totuși rămâne, ca și în cazul schemelor explicite.

Una dintre direcțiile de cercetare, luată ca una cu perspective, a fost utilizarea operatorilor triunghiulari  $B$ . În continuare sunt expuși algoritmi numerici elaborați, ce modelează matematic procesele neliniare în dioda semiconductoare cu utilizarea Metodelor Triunghiulare.

### 2.3.1 Algoritmul modelării numerice a proceselor neliniare în dispozitivul semiconductor cu aplicarea Metodei Gauss-Seidel (MGS)

În ecuația operatorială  $A * u = f$  reprezentăm matricea  $A = L + D + U$ , unde  $L$ ,  $D$ ,  $U$  sunt matricele sub-diagonală, diagonală și supra-diagonală, respectiv.

Fie  $y_k = \left( y_1^{(k)}, y_2^{(k)}, \dots, y_{(NN) \times (MM)}^{(k)} \right)$  vectorul soluție obținut la iterația ( $k$ ). Schema metodelor triunghiulare pe două straturi este

$$(D + \omega L) \left( \frac{y_{k+1} - y_k}{\omega} \right) + Ay_k = f, \quad k = 1, 2, \dots, y_0 \in N \quad (2.34)$$

Schema pe două nivele (2.18) cu  $B = D + \omega L$  și  $\tau_{k+1} \equiv \omega \equiv 1$  se numește Metoda Triunghiulară a lui Seidel, căreia i se mai spune Metoda Gauss-Seidel (MGS).

La prima etapă, în cadrul realizării algoritmului de modelare numerică a funcționalității diodei semiconductoare cu aplicarea MGS, au fost discretizate ecuațiile sistemului (1.17)-(1.19) astfel realizând trecerea la sistemul algebric neliniar (2.1), (2.5), (2.9). Au fost calculate valorile inițiale ale funcțiilor necunoscute conform relațiilor (2.10) pe întreg domeniul de definiție  $\bar{\Omega}$  și notate prin  $\varphi^{(0)}$ ,  $\varphi_n^{(0)}$ ,  $\varphi_p^{(0)}$ .

La următoarea etapă a fost organizat un ciclu extern în cadrul căruia, la fiecare iterație, cu pași mici, tensiunea aplicată la anod a fost mărită, iar valorile funcțiilor necunoscute au fost recalculat în condițiile echilibrului termodinamic și notate prin  $\varphi^{(m+1)}$ ,  $\varphi_n^{(m+1)}$ ,  $\varphi_p^{(m+1)}$ , unde ( $m + 1$ ) iterația curentă a ciclului extern.

În cadrul ciclului extern a fost organizat ciclul de rezolvare a sistemului algebric neliniar (2.1), (2.5), (2.9) având ordinul  $(3 * NN) \times (3 * MM)$  cu condițiile la frontieră (2.10)-(2.13). Valorile inițiale ale funcțiilor necunoscute, în cadrul acestui ciclu, au fost egalate cu valorile curente ale ciclului extern  $\varphi^{(n+1)} = \varphi^{(m+1)}$ ,  $\varphi_n^{(n+1)} = \varphi_n^{(m+1)}$ ,  $\varphi_p^{(n+1)} = \varphi_p^{(m+1)}$ , unde ( $n + 1$ ) iterația curentă a ciclului cu  $n = 0$ .

În cadrul ciclului de rezolvare a sistemului algebric neliniar de ordinul  $(3 * NN) \times (3 * MM)$  au fost organizate trei cicluri interne consecutive, pentru rezolvarea a câte un sistem algebric liniar de ordinul  $(NN - 1) \times (MM - 1)$ . Valorile inițiale ale funcțiilor necunoscute pentru fiecare ciclu intern au fost egalate cu valorile curente ale ciclului ce le conține  $\varphi^{(k+1)} = \varphi^{(n+1)}$ ,  $\varphi_n^{(k+1)} = \varphi_n^{(n+1)}$ ,  $\varphi_p^{(k+1)} = \varphi_p^{(n+1)}$ , unde ( $k + 1$ ) iterația curentă a ciclului intern cu  $k = 0$ , iar ( $n + 1$ ) iterația curentă al ciclului superior pentru rezolvarea sistemului de ordinul  $(3 * NN) \times (3 * MM)$ .

Sistemului algebric neliniar (2.1) i-a fost aplicată schema MGS pe două nivele (2.34), iar mai apoi ideea algoritmului lui Gummel pentru liniarizarea lui și separarea de sistemele (2.5) și

(2.9). Ca necunoscută a rămas doar potențialul electrostatic ( $\varphi$ ), iar cvasi-potențialul Fermi pentru electroni ( $\varphi_n$ ) și cvasi-potențialul Fermi pentru goluri ( $\varphi_p$ ) au fost luate ca constante, cu valori calculate la iterația precedentă. A fost obținut un sistem algebric liniar în necunoscuta potențialului electrostatic ( $\varphi$ ) de ordinul  $(NN - 1) \times (MM - 1)$ . Estimarea potențialului electrostatic ( $\varphi$ ) la iterația curentă ( $k + 1$ ), în nodurile interne ale rețelei ( $\Omega_h$ ), a fost realizată în baza sistemului

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

$$\text{cu } n_{ij}^{(k)} = n_i \exp\left(\frac{\varphi_{ij}^{(k)} - \varphi_{n,ij}^{(k)}}{\varphi_T}\right) \text{ și } p_{ij}^{(k)} = n_i \exp\left(\frac{\varphi_{p,ij}^{(k)} - \varphi_{ij}^{(k)}}{\varphi_T}\right) \text{ pe } \Omega_h \quad (2.35)$$

Valoarea curentă a potențialului electrostatic ( $\varphi^{(k+1)}$ ) a fost calculată iterativ în cadrul ciclului intern, până la atingerea exactității prestabilite.

La ieșirea din ciclul intern (2.35) au fost calculate valorile curente ale potențialului electrostatic ( $\varphi^{(k+1)}$ ) în nodurile de pe frontieră conform relațiilor (2.10), (2.11), iar valoarea curentă a potențialului electrostatic din cadrul ciclului superior ( $\varphi^{(n+1)}$ ) a fost egalată cu valoarea curentă a ciclului intern  $\varphi^{(n+1)} = \varphi^{(k+1)}$ .

Sistemului algebric neliniar (2.5) i-a fost aplicată schema MGS pe două nivele (2.34), iar mai apoi ideea algoritmului lui Gummel pentru liniarizarea lui și separarea de sistemele (2.1) și (2.9). Ca necunoscută a rămas doar cvasi-potențialul Fermi pentru electroni ( $\varphi_n$ ), iar potențialul electrostatic ( $\varphi$ ) și cvasi-potențialul Fermi pentru goluri ( $\varphi_p$ ) au fost luate ca constante cu valori calculate la iterația precedentă. A fost obținut un sistem algebric liniar în necunoscuta cvasi-potențialului Fermi pentru electroni ( $\varphi_n$ ) de ordinul  $(NN - 1) \times (MM - 1)$ . Estimarea cvasi-potențialului Fermi pentru electroni ( $\varphi_n$ ) la iterația curentă ( $k + 1$ ), în nodurile interne ale rețelei ( $\Omega_h$ ), a fost realizată conform sistemului

$$\varphi_{n,ij}^{(k+1)} = \varphi_{n,ij}^{(k)} + \frac{\frac{\mu_n}{h_{x_1}^2} n_{i+1/2,j}^{(k)} \varphi_{n,i+1,j}^{(k)} + \frac{\mu_n}{h_{x_1}^2} n_{i-1/2,j}^{(k+1)} \varphi_{n,i-1,j}^{(k+1)} + \frac{\mu_n}{h_{x_2}^2} n_{i,j+1/2}^{(k)} \varphi_{n,i,j+1}^{(k)} + \frac{\mu_n}{h_{x_2}^2} n_{i,j-1/2}^{(k+1)} \varphi_{n,i,j-1}^{(k+1)} + R_{SRH,ij}^{(k)} + R_{AUG,ij}^{(k)}}{\mu_n \left( \frac{n_{i+1/2,j}^{(k)} + n_{i-1/2,j}^{(k)}}{h_{x_1}^2} + \frac{n_{i,j+1/2}^{(k)} + n_{i,j-1/2}^{(k)}}{h_{x_2}^2} \right)}, \quad (2.36)$$

pe  $\Omega_h$  cu  $n_{i+1/2,j}^{(k)}$ ,  $n_{i-1/2,j}^{(k)}$ ,  $n_{i,j+1/2}^{(k)}$ ,  $n_{i,j-1/2}^{(k)}$ , calculate în seminodurile interne ale rețelei conform relațiilor (2.4).

Valoarea curentă a cvasi-potențialului Fermi pentru electroni ( $\varphi_n^{(k+1)}$ ) a fost calculată iterativ în cadrul ciclului intern, până la atingerea exactității prestabilite.



La ieșirea din ciclul intern (2.36) au fost calculate valorile curențe ale cvasi-potențialului Fermi pentru electroni  $(\varphi_n^{(k+1)})$  în nodurile de pe frontieră conform relațiilor (2.10), (2.12), iar valoarea curență a cvasi-potențialului Fermi pentru electroni din cadrul ciclului superior  $(\varphi_n^{(n+1)})$  a fost egalată cu valoarea curență a ciclului intern  $\varphi_n^{(n+1)} = \varphi_n^{(k+1)}$ .

Sistemului algebric neliniar (2.9) i-a fost aplicată schema MGS pe două nivele (2.34), iar mai apoi ideea algoritmului lui Gummel, pentru liniarizarea lui și separarea de sistemele (2.1) și (2.5). Ca necunoscută a rămas doar cvasi-potențialul lui Fermi pentru goluri  $(\varphi_p)$ , iar potențialul electrostatic  $(\varphi)$  și cvasi-potențialul Fermi pentru electroni  $(\varphi_n)$  au fost luate ca constante, cu valori calculate la iterația precedentă. Astfel, a fost obținut un sistem algebric liniar în necunoscuta cvasi-potențialului Fermi pentru goluri  $(\varphi_p)$  de ordinul  $(NN - 1) \times (MM - 1)$ . Estimarea cvasi-potențialului Fermi pentru goluri  $(\varphi_p)$ , la iterația curență  $(k + 1)$ , în nodurile interne ale rețelei  $(\Omega_h)$ , a fost realizată conform sistemului

$$\varphi_{p,ij}^{(k+1)} = \varphi_{p,ij}^{(k)} + \frac{\left[ \frac{\mu_p}{h_{x_1}^2} p_{i+1/2,j}^{(k)} \varphi_{p,i+1,j}^{(k)} + \frac{\mu_p}{h_{x_1}^2} p_{i-1/2,j}^{(k+1)} \varphi_{p,i-1,j}^{(k+1)} + \frac{\mu_p}{h_{x_2}^2} p_{i,j-1/2}^{(k)} \varphi_{p,i,j+1}^{(k)} + \frac{\mu_p}{h_{x_2}^2} p_{i,j+1/2}^{(k+1)} \varphi_{p,i,j-1}^{(k+1)} - R_{SRH,ij}^{(k)} - R_{AUG,ij}^{(k)} \right]}{\left[ \mu_p \left( \frac{p_{i+1/2,j}^{(k)} + p_{i-1/2,j}^{(k)}}{h_{x_1}^2} + \frac{p_{i,j+1/2}^{(k)} + p_{i,j-1/2}^{(k)}}{h_{x_2}^2} \right) \right]} \quad (2.37)$$

pe  $\Omega_h$  cu  $p_{i+1/2,j}^{(k)}$ ,  $p_{i-1/2,j}^{(k)}$ ,  $p_{i,j+1/2}^{(k)}$ ,  $p_{i,j-1/2}^{(k)}$ , calculate în seminodurile interne ale rețelei conform relațiilor (2.8).

Valoarea curență a cvasi-potențialului Fermi pentru goluri  $(\varphi_p^{(k+1)})$  a fost calculată iterativ în cadrul ciclului intern, până la atingerea unei exactități prestabilite.

La ieșirea din ciclul intern (2.37) au fost calculate valorile curențe ale cvasi-potențialului Fermi pentru goluri  $(\varphi_p^{(k+1)})$  în nodurile de pe frontieră, conform relațiilor (2.10), (2.13), iar valoarea curență a cvasi-potențialului Fermi pentru goluri din cadrul ciclului superior  $(\varphi_p^{(n+1)})$  a fost egalată cu valoarea curență a ciclului intern  $\varphi_p^{(n+1)} = \varphi_p^{(k+1)}$ .

Ciclul de rezolvare a sistemului algebric neliniar (2.1), (2.5), (2.9), având ordinul  $((3 * NN) \times (3 * MM))$ , a rulat până când a fost calculată soluția sistemului algebric  $\{\varphi^{(n+1)}, \varphi_n^{(n+1)}, \varphi_p^{(n+1)}\}$  cu exactitatea prestabilă.

La ieșirea din acest ciclu s-a trecut la următoarea iterație a ciclului extern în cadrul căreia valorile externe ale funcțiilor necunoscute au fost modificate  $\varphi^{(m+1)} = \varphi^{(n+1)}$ ,  $\varphi_n^{(m+1)} =$

$= \varphi_n^{(n+1)}, \varphi_p^{(m+1)} = \varphi_p^{(n+1)}$ , cu  $(m + 1)$  iterația curentă a ciclului extern. În cadrul aceleiași iterații externe a fost mărită tensiunea aplicată la anod  $V_a$  și recalulate valorile variabilelor  $\{\varphi^{(m+1)}, \varphi_n^{(m+1)}, \varphi_p^{(m+1)}\}$  în condițiile echilibrului termodinamic. Procesul iterativ extern a rulat până când  $V_a$  a depășit valoarea 0,2 A.

A fost stabilită complexitatea algoritmului modelării numerice a proceselor neliniare în dispozitivul semiconductor cu aplicarea MGS, teoretic. Analizând schema MGS (2.34) s-a constatat că pentru realizarea ei au fost efectuate o operație de înmulțire a matricei la un vector și trei operații aritmetice asupra vectorilor (de scădere, adunare și împărțirea la un scalar). Dacă notăm prin  $nn \times nn$  ordinul matricei  $A$  și luând în calcul că este o matrice predominant cinci diagonală, numărul total de operații la o iterație a fost calculat în baza următoarelor componente  $t_0 = 5nn$  ca numărul de operații scalare necesare pentru calcularea valorilor inițiale,  $t_1 = 11nn$  numărul de adunări/scăderi ale scalarilor la realizarea unei iterații interne,  $t_2 = 9nn$ , numărul de înmulțiri/împărțiri ale scalarilor la realizarea unei iterații interne.

Numărul minim de iterații  $k_0$ , estimat teoretic în cazul MGS, necesar pentru determinarea soluției cu exactitatea prestabilită este

$$k_0(\text{eroarea}) = \frac{\ln(\text{eroarea})}{\ln(\rho)} \approx 0,1NM^2 \ln \frac{1}{\text{eroarea}} \quad (2.38)$$

unde  $NM$  este numărul de noduri ale rețelei pe o direcție. Astfel, numărul minim de iterații este proporțional cu pătratul numărului de noduri pe o direcție, de unde rezultă că este proporțională cu numărul de necunoscute ale sistemului algebric  $nn$ .

Numărul total de operații necesar pentru calcularea soluției sistemului (2.1), (2.5), (2.9) este  $T = 60 * nn * k_0 + 5 * nn$  operații.

Conform teoriei, viteza de convergență a MGS, notată cu  $\rho$

$$\rho = \left( \frac{1-\sqrt{\xi}}{1+\sqrt{\xi}} \right)^{1/2}, \quad \xi = \frac{\gamma_1}{\gamma_2}, \quad \gamma_1 = \frac{8}{h^2} \sin^2 \frac{\pi h}{2}, \quad \gamma_2 = \frac{8}{h^2} \cos^2 \frac{\pi h}{2} \quad (2.39)$$

unde  $h_i$  este pasul rețele,  $\gamma_1$  și  $\gamma_2$  sunt valorile proprii ale lui  $A$  maximală și minimală, respectiv.

Ordinul de convergență al MGS, estimat teoretic este

$$\mathcal{O}(h_i^2) \quad (2.40)$$

Rezultate numerice obținute în urma experimentelor asupra modelului numeric al diodei semiconductoare, cu utilizarea MGS

a) Tabelul numărului mediu de iterații, efectuate pentru calculării soluțiilor cu exactitatea prestabilită de ordinul  $10^{-10}$ , obținut în urma măsurărilor experimentale asupra

algoritmului numeric ce modelează matematic procesele neliniare în dioda semiconductoare (cazul MGS), implementat pe o rețea de noduri ( $16 \times 32$ ):

**Tabel 2.2: Numărul mediu de iterații. Cazul tripletului de necunoscute  $\{\varphi, \varphi_n$  și  $\varphi_p\}$  cu aplicarea MGS**

nr. de iterații interne, pentru $\varphi$	nr. de iterații interne, pentru $\varphi_n$	nr. de iterații interne, pentru $\varphi_p$	nr. total de iterații	nr. total de iterații externe	Durata (minute)
3348	602359	628368	1234075	187	780

b) Suprafețele funcțiilor  $\varphi$ ,  $\varphi_n$  și  $\varphi_p$ , construite în baza rezultatelor experimentale, obținute la rezolvarea problemei diodei semiconductoare cu utilizarea MGS, sunt prezentate *Anexa 1*.

MGS are o convergență lentă către soluția exactă a sistemului, dar în cazul acestei metode se câștigă în viteza de convergență, datorită numărului de calcule mai mic la fiecare iterație, în comparație cu MIS.

### 2.3.2 Algoritmul modelării numerice a proceselor neliniare în dispozitivul semiconductor cu aplicarea Metodei Relaxării (MR)

Pentru convergența mai rapidă a metodelor iterative triunghiulare, care devin tot mai lente odată cu creșterea ordinului matricei sistemului algebric, a fost căutată valoarea optimală a parametrului  $\omega$  din schema acestor metode, ca o îmbunătățire a acestor tehnici

$$(D + \omega L) \frac{y_{k+1} - y_k}{\omega} + Ay_k = f, k = 1, 2, \dots, y_0 \in H \quad (2.41)$$

unde  $A = L + D + U$ .

Accelerarea convergenței proceselor iterative a fost posibilă doar având informații apriori despre valorile proprii ale matricei sistemului.

Condiția necesară și suficientă pentru ca metoda iterativă triunghiulară să fie convergentă este ca raza spectrală a matricei rezolvante să fie mai mică ca unu.

Dificultatea aplicării acestui criteriu este că în unele cazuri problema determinării valorilor proprii ale matricei este mai complicată decât însăși rezolvarea sistemului  $Au = f$ . Astfel s-a căutat obținerea unor metode triunghiulare accelerate, care să ocolească problema determinării valorilor proprii.

Sisteme ale căror matrice  $A$  este pozitiv definită (de obicei și simetrică) au valorile proprii pozitive. Fie  $\lambda_{max}$  și  $\lambda_{min}$  cea mai mare și cea mai mică valoare proprie, respectiv. În cazul sistemelor pozitiv definite valorile proprii sunt mai ușor de calculat.

Metoda Relaxării este o metodă iterativă utilizată pentru rezolvarea numerică a sistemelor algebrice liniare cu matricea coeficienților simetrică și pozitiv definită.

Schema iterativă a Metodei Relaxării sub forma canonică este

$$(D + \omega L) y_{k+1} = (D + \omega L) y_k - \omega A y_k + \omega f, \quad k = 1, 2, \dots, \quad y_0 \in H \quad (2.42)$$

Pentru  $\omega > 1$  metoda se numește Metoda Relaxării Superioare (MRS), pentru  $\omega < 1$ , Metoda Relaxării Inferioare (MRI), iar pentru  $\omega = 1$ , Metoda Simplei Relaxări (MSR).

**Teorema 2.2:** *(Condiția necesară de convergență) Fie matricea  $A$  simetrică și pozitiv definită. Metoda Relaxării converge pentru orice aproximare inițială a soluției  $y^{(0)}$  dacă  $\omega \in (0; 2)$ .*

**Remarca 2.1:** *Condiția  $\omega \in (0; 2)$  este o condiție necesară de convergență a metodei relaxării cu orice valoare inițială a soluției  $y^{(0)}$  și pentru matricea  $A$  oarecare.*

Viteza de convergență ( $\rho$ ) către soluția exactă este determinată de alegerea valorii parametrului metodei  $\omega$ . Se știe că la rezolvarea unor clase de sisteme rare viteza de convergență a metodelor iterative triunghiulare MIT este de ordinul  $\vartheta(nn^2)$  iterații, iar cu o alegere optimă a parametrului metodei ( $\omega$ ) gradul de convergență al metodei este de ordinul  $\vartheta(nn)$  iterații, unde  $nn \times nn$  ordinul matricei  $A$ .

În caz general nu există o formulă pentru calcularea valorii optime a parametrului metodei ( $\omega_{opt}$ ), care ar asigura convergența cea mai rapidă. La rezolvarea unui sistem de ecuații poate fi folosită formula  $\omega_{opt} \approx 2 - \vartheta(h_i)$ , unde  $h_i$  este pasul rețelei folosit la discretizarea ecuației în derivate parțiale.

O estimare mai exactă, în unele cazuri, ale parametrului metodei poate fi expresia

$$\omega_{opt} = \frac{2}{1 + \sqrt{\gamma_1(2 - \gamma_1)}}, \quad \text{unde } \gamma_1 \text{ este limita inferioară a spectrului operatorului } A.$$

La prima etapă, conform algoritmului elaborat pentru modelare numerică a funcționalității diodei semiconductoare cu aplicarea MR, au fost discretizate ecuațiile sistemului (1.17)-(1.19) astfel realizând trecerea la sistemul algebric neliniar (2.1), (2.5), (2.9). Au fost calculate valorile inițiale ale funcțiilor necunoscute conform relațiilor (2.10) cu  $V_a = 0$ , pe întreg domeniul de definiție  $\bar{\Omega}$  și notate prin  $\varphi^{(0)}$ ,  $\varphi_n^{(0)}$ ,  $\varphi_p^{(0)}$ .

La următoarea etapă a fost organizat un ciclu extern în cadrul căruia, la fiecare iterație, cu pași mici, tensiunea aplicată la anod a fost mărită, iar valorile funcțiilor necunoscute au fost recalculat în condițiile echilibrului termodinamic și notate prin  $\varphi^{(m+1)}$ ,  $\varphi_n^{(m+1)}$ ,  $\varphi_p^{(m+1)}$ , unde  $(m + 1)$  iterația curentă a ciclului extern.

În cadrul ciclului extern a fost organizat ciclul de rezolvare a sistemului algebric neliniar (2.1), (2.5), (2.9) de ordinul  $(3 * NN) \times (3 * MM)$ , cu condițiile la frontieră (2.10)-(2.13). Valorile inițiale ale funcțiilor necunoscute, în cadrul acestui ciclu, au fost egale cu valorile curente ale ciclului extern  $\varphi^{(n+1)} = \varphi^{(m+1)}$ ,  $\varphi_n^{(n+1)} = \varphi_n^{(m+1)}$ ,  $\varphi_p^{(n+1)} = \varphi_p^{(m+1)}$ , unde  $(n + 1)$  iterația curentă a ciclului cu  $n = 0$ .

În cadrul ciclului de rezolvare a sistemului algebric neliniar de ordinul  $(3 * NN) \times (3 * MM)$  au fost organizate trei cicluri interne consecutive pentru rezolvarea a câte un sistem algebric liniar de ordinul  $(NN - 1) \times (MM - 1)$ . Valorile inițiale ale funcțiilor necunoscute, pentru fiecare ciclu intern, au fost egale cu valorile curente ale ciclului ce le conține  $\varphi^{(k+1)} = \varphi^{(n+1)}$ ,  $\varphi_n^{(k+1)} = \varphi_n^{(n+1)}$ ,  $\varphi_p^{(k+1)} = \varphi_p^{(n+1)}$ , unde  $(k + 1)$  iterația curentă a ciclului intern cu  $k = 0$ , iar  $(n + 1)$  iterația curentă a ciclului superior pentru rezolvarea sistemului de ordinul  $(3 * NN) \times (3 * MM)$ .

Sistemului algebric neliniar (2.1) i-a fost aplicată schema MR pe două nivele (2.42), iar mai apoi ideea algoritmului lui Gummel pentru liniarizarea lui și separarea de sistemele (2.5) și (2.9). Ca necunoscută a rămas doar potențialul electrostatic ( $\varphi$ ), iar cvasi-potențialul lui Fermi pentru electroni ( $\varphi_n$ ) și cvasi-potențialul lui Fermi pentru goluri ( $\varphi_p$ ) au fost luate ca constante, cu valori calculate la iterația precedentă. A fost obținut un sistem algebric liniar în necunoscuta potențialului electrostatic ( $\varphi$ ) de ordinul  $(NN - 1) \times (MM - 1)$ . Estimarea potențialului electrostatic ( $\varphi$ ) la iterația curentă  $(k + 1)$ , în nodurile interne ale rețelei ( $\Omega_h$ ), a fost realizată conform sistemului

$$\varphi_{ij}^{(k+1)} = (1 - \omega)\varphi_{ij}^{(k)} + \frac{\frac{\omega}{h_{x_1}^2}\varphi_{i+1,j}^{(k)} + \frac{\omega}{h_{x_1}^2}\varphi_{i-1,j}^{(k+1)} + \frac{\omega}{h_{x_2}^2}\varphi_{i,j+1}^{(k)} + \frac{\omega}{h_{x_2}^2}\varphi_{i,j-1}^{(k+1)} + q\omega(p_{ij}^{(k)} - n_{ij}^{(k)} + N_{ij}^{(k)})}{\frac{2}{h_{x_1}^2} + \frac{2}{h_{x_2}^2}} \quad (2.43)$$

$$\text{cu } n_{ij}^{(k)} = n_i \exp\left(\frac{\varphi_{ij}^{(k)} - \varphi_{n,ij}^{(k)}}{V_T}\right) \text{ și } p_{ij}^{(k)} = n_i \exp\left(\frac{\varphi_{p,ij}^{(k)} - \varphi_{ij}^{(k)}}{V_T}\right) \quad (2.44)$$

Valoarea curentă a potențialului electrostatic ( $\varphi^{(k+1)}$ ) a fost calculată iterativ, în cadrul ciclului intern, până la atingerea exactității prestabilite.

La ieșirea din ciclul intern (2.43) au fost calculate valorile curente ale potențialului electrostatic ( $\varphi^{(k+1)}$ ) în nodurile de pe frontieră conform relațiilor (2.10), (2.11), iar valoarea curentă a potențialului electrostatic din cadrul ciclului superior ( $\varphi^{(n+1)}$ ) a fost egalată cu valoarea curentă a ciclului intern  $\varphi^{(n+1)} = \varphi^{(k+1)}$ .

Sistemului algebric neliniar (2.5) i-a fost aplicată schema MR pe două nivele (2.42) și ideea algoritmului Gummel pentru liniarizarea lui și separarea de sistemele (2.1) și (2.9). Ca

necunoscută a rămas doar cvasi-potențialul lui Fermi pentru electroni ( $\varphi_n$ ), iar potențialul electrostatic ( $\varphi$ ) și cvasi-potențialul lui Fermi pentru goluri ( $\varphi_p$ ) au fost luate ca constante cu valori calculate la iterația precedentă. A fost obținut un sistem algebric liniar în necunoscuta cvasi-potențialul lui Fermi pentru electroni ( $\varphi_n$ ) de ordinul  $(NN - 1) \times (MM - 1)$ . Estimarea valorilor lui  $\varphi_n$ , la iterația curentă ( $k + 1$ ), în nodurile interne ale rețelei ( $\Omega_h$ ), a fost realizată conform sistemului

$$\varphi_{n,ij}^{(k+1)} = (1 - \omega)\varphi_{n,ij}^{(k)} + \omega * \frac{\left[ \frac{\mu_n n_{i+1/2,j}^{(k)} \varphi_{n,i+1,j}^{(k)} + \frac{\mu_n n_{i-1/2,j}^{(k+1)} \varphi_{n,i-1,j}^{(k+1)} + \frac{\mu_n n_{i,j+1/2}^{(k)} \varphi_{n,i,j+1}^{(k)} + \frac{\mu_n n_{i,j-1/2}^{(k+1)} \varphi_{n,i,j-1}^{(k+1)} + R_{SRH,ij}^{(k)} + R_{AUG,ij}^{(k)}}{h_{x_1}^2} \right]}{\left[ \mu_n \left( \frac{n_{i+1/2,j}^{(k)} + n_{i-1/2,j}^{(k+1)}}{h_{x_1}^2} + \frac{n_{i,j+1/2}^{(k)} + n_{i,j-1/2}^{(k+1)}}{h_{x_2}^2} \right) \right]}, \quad (2.45)$$

cu  $n_{i+1/2,j}^{(k)}$ ,  $n_{i-1/2,j}^{(k)}$ ,  $n_{i,j+1/2}^{(k)}$ ,  $n_{i,j-1/2}^{(k)}$ , calculate în seminodurile interne ale rețelei conform relațiilor (2.4).

Valoarea curentă a cvasi-potențialului Fermi pentru electroni ( $\varphi_n^{(k+1)}$ ) a fost calculată iterativ în cadrul ciclului intern, până la atingerea exactității prestabilite.

La ieșirea din ciclul intern (2.45) au fost calculate valorile curente ale cvasi-potențialului Fermi pentru electroni ( $\varphi_n^{(k+1)}$ ) în nodurile de pe frontieră conform relațiilor (2.10), (2.12), iar valoarea curentă a cvasi-potențialului Fermi pentru electroni din cadrul ciclului superior ( $\varphi_n^{(n+1)}$ ) a fost egalată cu valoarea curentă a ciclului intern  $\varphi_n^{(n+1)} = \varphi_n^{(k+1)}$ .

Sistemului algebric neliniar (2.9) i-a fost aplicată schema MR pe două nivele (2.42), iar mai apoi ideea algoritmului lui Gummel pentru liniarizarea lui și separarea de sistemele (2.1) și (2.5). Ca necunoscută a rămas doar cvasi-potențialul lui Fermi pentru goluri ( $\varphi_p$ ), iar potențialul electrostatic ( $\varphi$ ) și cvasi-potențialul lui Fermi pentru electroni ( $\varphi_n$ ) au fost luate ca constante cu valori calculate la iterația precedentă. A fost obținut un sistem algebric liniar în necunoscuta cvasi-potențialului Fermi pentru goluri ( $\varphi_p$ ) de ordinul  $(NN - 1) \times (MM - 1)$ . Estimarea cvasi-potențialului Fermi pentru goluri ( $\varphi_p$ ) la iterația curentă ( $k + 1$ ), în nodurile interne ale rețelei ( $\Omega_h$ ), a fost realizată conform sistemului

$$\varphi_{p,ij}^{(k+1)} = (1 - \omega)\varphi_{p,ij}^{(k)} + \omega * \frac{\left[ \frac{\mu_p p_{i+1/2,j}^{(k)} \varphi_{p,i+1,j}^{(k)} + \frac{\mu_p p_{i-1/2,j}^{(k+1)} \varphi_{p,i-1,j}^{(k+1)} + \frac{\mu_p p_{i,j+1/2}^{(k)} \varphi_{p,i,j+1}^{(k)} + \frac{\mu_p p_{i,j-1/2}^{(k+1)} \varphi_{p,i,j-1}^{(k+1)} - R_{SRH,ij}^{(k)} - R_{AUG,ij}^{(k)}}{h_{x_1}^2} \right]}{\left[ \mu_p \left( \frac{p_{i+1/2,j}^{(k)} + p_{i-1/2,j}^{(k+1)}}{h_{x_1}^2} + \frac{p_{i,j+1/2}^{(k)} + p_{i,j-1/2}^{(k+1)}}{h_{x_2}^2} \right) \right]}, \quad (2.46)$$

cu  $p_{i+1/2,j}^{(k)}$ ,  $p_{i-1/2,j}^{(k)}$ ,  $p_{i,j+1/2}^{(k)}$ ,  $p_{i,j-1/2}^{(k)}$ , calculate în seminodurile interne ale rețelei conform relațiilor (2.8).

Valoarea curentă a cvasi-potențialului Fermi pentru goluri  $(\varphi_p^{(k+1)})$  a fost calculată iterativ în cadrul ciclului intern, până la atingerea exactității prestabilite.

La ieșirea din ciclul intern (2.46) au fost calculate valorile curente ale cvasi-potențialului Fermi pentru goluri  $(\varphi_p^{(k+1)})$  în nodurile de pe frontieră, conform relațiilor (2.13), iar valoarea curentă a cvasi-potențialului Fermi pentru goluri din cadrul ciclului superior  $(\varphi_p^{(n+1)})$  a fost egalată cu valoarea curentă a ciclului intern  $\varphi_p^{(n+1)} = \varphi_p^{(k+1)}$ .

Ciclul rezolvării sistemului algebric neliniar (2.1), (2.5), (2.9) de ordinul  $((3 * NN) \times (3 * MM))$  a rulat atât timp până când a fost obținută exactitatea prestabilită pentru soluția  $\{\varphi^{(n+1)}, \varphi_n^{(n+1)}, \varphi_p^{(n+1)}\}$ .

La ieșirea din acest ciclu s-a trecut la următoarea iterație a ciclului extern în cadrul căreia valorile externe ale funcțiilor necunoscute au fost modificate  $\varphi^{(m+1)} = \varphi^{(n+1)}$ ,  $\varphi_n^{(m+1)} = \varphi_n^{(n+1)}$ ,  $\varphi_p^{(m+1)} = \varphi_p^{(n+1)}$ , cu  $(m + 1)$  iterația curentă a ciclului extern. În cadrul aceleiași iterații externe a fost mărită tensiunea aplicată la anod  $V_a$  și recalculat valorile variabilelor  $\{\varphi^{(m+1)}, \varphi_n^{(m+1)}, \varphi_p^{(m+1)}\}$  în condițiile echilibrului termodinamic conform relațiilor (2.10). Procesul iterativ extern a rulat până când  $V_a$  a depășit valoarea 0,2 A.

A fost stabilită complexitatea algoritmului elaborat pentru modelarea numerică a proceselor neliniare în dispozitivul semiconductor cu aplicarea MR, teoretic. Analizând schema MR (2.42) s-a constatat că pentru realizarea ei au fost efectuate două operații de înmulțire a matricei la un vector și patru operații aritmetice asupra vectorilor (de adunare, scădere, înmulțire la o constantă, împărțire la o constantă). Dacă notăm prin  $nn \times nn$  ordinul matricei  $A$  și luând în calcul că este o matrice predominant cinci diagonală, numărul total de operații la o iterație a fost calculat în baza următoarelor componente  $t_0 = 5nn$  ca număr de operații scalare necesare pentru calcularea valorilor inițiale,  $t_1 = 6nn$  numărul de adunări/scăderi ale scalarilor la realizarea unei iterații interne,  $t_2 = 6nn$  numărul de înmulțiri/împărțiri ale scalarilor la realizarea unei iterații interne.

Numărul minim de iterații necesar  $k_0$ , estimat teoretic în cazul MR, pentru determinarea soluției cu exactitatea prestabilită este

$$k_0(\text{eroarea}) = \ln\left(\frac{1}{\text{eroare}}\right) * \frac{2n}{\pi} \approx 0,64 * NM * \ln\frac{1}{\text{eroare}} \quad (2.47)$$

unde  $NM$  este numărul de noduri ale rețelei pe o direcție. Astfel, numărul minim de iterații este proporțional cu numărul de noduri pe o direcție de unde rezultă că este proporțional cu rădăcina de ordinul doi din numărul de necunoscute ale sistemului algebric  $\sqrt{nn}$ .

Numărul total de operații necesar pentru calcularea soluției sistemului (2.1), (2.5), (2.9) este  $T = 45 * nn * k_0 + 5 * nn$  operații.

Conform teoriei viteza de convergență a metodei iterative ( $\rho$ ) în cazul MR este

$$\rho = \left( \frac{1-\sqrt{\xi}}{1+\sqrt{\xi}} \right)^{1/2}, \quad \xi = \frac{\gamma_1}{\gamma_2}, \quad \gamma_1 = 2 \sin^2 \frac{\pi}{2NM}, \quad \gamma_2 = \frac{8}{h_i^2} \cos^2 \frac{\pi h_i}{2} \quad (2.48)$$

unde  $h_i$  este pasul rețele,  $\gamma_1$  și  $\gamma_2$  sunt valori proprii ale matricei  $A$  maximală și minimală, respectiv.

Ordinul de convergență al MR, estimat teoretic, este

$$\mathcal{O}(h_i^1) \quad (2.49)$$

Rezultate numerice, obținute în urma experimentelor asupra modelului numeric al diodei semiconductoare cu utilizarea Metodei Relaxării Superioare, ca cea mai efektivă cu  $\omega_{opt} = 1,64$ :

a) Tabelul numărului mediu de iterații, efectuate pentru calculării soluțiilor cu exactitatea prestabilită de ordinul  $10^{-10}$ , obținut în urma măsurărilor experimentale asupra algoritmului numeric ce modelează matematic procesele neliniare în dioda semiconductoare (cazul MRS), implementat pe o rețea de noduri ( $16 \times 32$ ):

**Tabel 2.3: Numărul mediu de iterații. Cazul tripletului de necunoscute  $\{\varphi, \varphi_n$  și  $\varphi_p\}$  cu aplicarea MRS**

nr. de iterații interne, în mediu, pentru $\varphi$	nr. de iterații interne, în mediu, pentru $\varphi_n$	nr. de iterații interne, în mediu, pentru $\varphi_p$	nr. total de iterații	nr. de iterații externe	Durata (minute)
515	20391	22058	42964	42	20

b) Suprafețele funcțiilor  $\varphi$ ,  $\varphi_n$  și  $\varphi_p$ , construite în baza rezultatelor experimentale, obținute la rezolvarea problemei diodei semiconductoare cu utilizarea MRS, sunt prezentate în *Anexa 1*.

MRS are o convergență moderată către soluția exactă a sistemului, în cazul acestei metode se câștigă mult la viteza de convergență, datorită micșorării numărului de calcule la fiecare iterație, în comparație cu MIS și MGS.



## 2.4 Modelarea numerică a proceselor neliniare în dispozitivul semiconductor cu aplicarea parametrilor Cebîșev

La rezolvarea multor probleme din analiza numerică, o aplicare reușită ce ține de minimizarea erorilor, a fost utilizarea polinoamelor lui Cebîșev.

Polinomul  $T_n(x)$  de gradul  $n$  cu coeficientul superior egal cu 1, care dintre toate polinoamele de gradul  $n$  cu coeficientul superior egal cu 1 are valoarea  $\max_{x \in [-1,1]} |T_n(x)|$  minimă se numește polinomul lui Cebîșev.

Unul dintre polinoamele lui Cebîșev este funcția

$$T_n(x) = 2^{1-n} \cos(n \cdot \arccos(x)).$$

Pentru cazul unui segment arbitrar  $[a, b]$  unul dintre polinoamele lui Cebîșev este funcția

$$T_n(x) = \frac{(b-a)^n}{2^{2n-1}} \cos\left(n \cdot \arccos \frac{2x-(b-a)}{b-a}\right) \quad (2.50)$$

Rădăcinile acestui polinom sunt  $x_k = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} \cos\left(\frac{(2k+1)\pi}{2n}\right)$ ,  $k = 0, 1, \dots, n-1$ , iar devierea lui de la zero este calculată conform expresiei  $\max_{x \in [a,b]} |T_n(x)| = \frac{(b-a)^n}{2^{2n-1}}$ .

În teoria metodelor iterative ades este necesar de a găsi un polinom  $P_n(x)$  de gradul  $n$  cu deviația de la zero minimă pe intervalul  $[a, b]$  pentru care  $P_n(0) = 1$ .

Un astfel de polinom este

$$P_n(x) = (-1)^n q_n \cos\left(n \cdot \arccos \frac{2x-(b-a)}{b-a}\right) \quad (2.51)$$

unde  $q_n = \frac{2\rho_0^n}{1+\rho_0^{2n}}$ ,  $\rho_0 = \frac{1-\sqrt{\xi}}{1+\sqrt{\xi}}$ ,  $\xi = \frac{a}{b}$ ,  $b > a > 0$  (2.52)

Rădăcinile acestui polinom sunt  $x_k = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} \cos\left(\frac{(2k+1)\pi}{2n}\right)$ ,  $k = 1, 2, \dots, n$ .

Câteva direcții de aplicare ale polinoamelor lui Cebîșev:

- a. În teoria interpolărilor.
- b. La găsirea parametrilor optimali ai metodelor iterative.

### 2.4.1 Algoritmul modelării numerice cu aplicarea Metodei Parametrilor Cebîșev pe 2 Nivele (MPC2N)

La crearea algoritmului de modelare numerică a funcționalității dispozitivului semiconductor cu utilizarea parametrilor Cebîșev, descris în acest subcapitol, pentru rezolvarea ecuației operatoriale  $A * u = f$  a fost utilizată o schemă pe două nivele  $B \frac{y_{k+1} - y_k}{\tau_{k+1}} + Ay_k = f_k$ ,  $k = 1, 2, \dots$ , cu aproximația inițială  $y_0 \in H$  și cu  $B = E$ , unde  $A$  este o matrice de ordinul  $(nn \times nn)$ , simetrică și pozitiv definită.

La prima etapă a fost determinat șirul de parametri optimali ai metodei,  $\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_n$ , pentru care norma erorii  $\|y_k - y\|$  la iterația  $k$  a fost minimă. Pentru calcularea normei a fost folosită formula  $\|y\| = \sqrt{(y, y)} = \sqrt{\sum_{j=1}^n |y_j|^2}$ , unde  $y_j$  este coordonata  $j$  a vectorului  $y$ .

*Teorema 2.3 Fie  $A$  o matrice simetrică și pozitiv definită cu  $\lambda_{\max}(A) > \lambda_{\min}(A) > 0$ , valorile proprii minimală și maximală, respectiv. Fie  $k_0$  numărul minim de iterații necesar pentru calcularea soluției cu o exactitate prestabilită. Între metodele ce utilizează schema pe două nivele cea mai mică eroare  $\|y_k - y\|$  o are cea pentru care parametrii sunt calculați conform relației*

$$\tau_k = \frac{\tau_0}{1 + \rho_0 t_k}, \quad k = 1, 2, \dots, k_0, \quad (2.54)$$

$$\tau_0 = \frac{2}{\lambda_{\min}(A) + \lambda_{\max}(A)}, \quad \rho_0 = \frac{1 - \sqrt{\xi}}{1 + \sqrt{\xi}}, \quad \xi = \frac{\lambda_{\min}(A)}{\lambda_{\max}(A)}, \quad t_k = \cos\left(\frac{(2k-1)\pi}{2n}\right), \quad k = 0, 1, \dots, (k_0 - 1) \quad (2.55)$$

iar pentru estimarea erorii este adevărată relația

$$\|y_{k_0} - u\|_B \leq q_k \|y_k - u\| \quad (2.56)$$

$$q_k = \frac{2\rho_0^k}{1 + \rho_0^{2k}} \quad (2.57)$$

La variații mici ale lui  $\xi$  estimarea numărului minim de iterații pentru determinarea soluției cu exactitatea prestabilită este

$$k_0(\text{eroare}) = \ln(\text{eroare}) / \ln(\rho) \quad (2.58)$$

Metoda ce utilizează schema pe două nivele (2.18) cu parametrii  $\tau_k$  calculați conform relațiilor (2.54) se numește Metoda iterativă pe două nivele cu aplicarea Parametrilor Cebîșev (MPC2N).

În algoritmul modelării numerice a proceselor neliniare din dispozitivul semiconductor, cu aplicarea MPC2N, a fost folosit calculul pe componente, deoarece matricial nu a fost avantajos ținând cont de faptul că matricea sistemului algebric este rară. Astfel și determinarea valorilor proprii  $\lambda_{\min}(A)$  și  $\lambda_{\max}(A)$  ale matricei  $A$  a devenit problematică (mai exact spus ineficientă).

Pașii algoritmului de determinare a valorilor proprii maximală și minimală, aplicat în cercetare, este

a. a fost estimată valoarea proprie maximală, în cazul problemei (2.1), (2.5), (2.9), care s-a observat că este o valoare constantă și depinde doar de domeniul de definiție al funcțiilor necunoscute și pasul rețelei

$$\lambda_{\max}(A) = \frac{4}{h_{x_1}^2} \cos^2\left(\frac{\pi h_{x_1}}{2l_{x_1}}\right) + \frac{4}{h_{x_2}^2} \cos^2\left(\frac{\pi h_{x_2}}{2l_{x_2}}\right) \quad (2.59)$$

b. valoarea proprie minimală a fost căutată conform expresiei teoretice înmulțită la o constantă, a cărei valoare a fost determinată experimental

$$\lambda_{min}(A) = \lambda_{min}^{(teoretic)} * \alpha = \varepsilon \left( \frac{\pi^2}{l_{x_1}^2} + \frac{\pi^2}{l_{x_2}^2} \right) * \alpha \quad (2.60)$$

Tabelul valorilor parametrului  $\alpha$ , determinate experimental în cadrul testării algoritmului numeric pentru modelarea diodei semiconductoare:

**Tabel 2.4: Tabelul valorilor parametrului  $\alpha$ , determinate experimental, cazul MPC2N**

$\alpha$	0,05	0,1	0,2	0,4	$\alpha^{optim}$ <b>0,6</b>	0,8	1	1,2
nr. de iterații	121	109	91	79	<b>73</b>	80	86	93

Valoarea cea mai eficientă pentru parametrul metodei aplicate a fost  $\alpha^{(eficient)} = 0,6$ .

Conform teorie, numărul de iterații minimal, necesar pentru calcularea soluției cu exactitatea prestabilită în cazul MPC2N, se determină conform expresiei

$$k_{teoretic}(eroare) = \ln(error) / \ln(\rho_0), \text{ cu } \rho_0 = \frac{1-\sqrt{\xi}}{1+\sqrt{\xi}} \text{ și } \xi = \frac{\lambda_{min}^{teoretic}}{\lambda_{max}(A)}.$$

În practică a fost estimat conform relației

$$k_0 = [k_{teoretic}] + 1 \quad (2.61)$$

Prin  $\mathfrak{M}_{k_0}$  a fost notată mulțimea rădăcinilor polinomului Cebîșev

$$\mathfrak{M}_{k_0} = \left\{ -\cos \frac{2i-1}{2k_0} \pi, i = 1, 2, \dots, k_0 \right\} \quad (2.62)$$

Parametrii iterativi ai MPC2N au fost calculați conform relației

$$\tau_k = \tau_0 / (1 + \rho_0 \mu_k), \quad \mu_k \in \mathfrak{M}_{k_0}, \quad k = 1, 2, \dots, k_0 \quad (2.63)$$

c. Consecutivitatea rădăcinilor polinomului lui Cebîșev, aplicate la calcularea parametrilor metodei, are o mare importanță. De ordinea utilizării lor depinde viteza de convergență a metodei, iar în cazul unei consecutivități nereușite poate avea loc așa numitul ”*avost al mașinii*”, fenomen care apare ca efect al creșterii numărului iterațiilor intermediare sau odată cu acumularea erorilor ca urmare a calculului aproximativ.

În cercetare a fost aplicată teoria ce face posibil de identificat *consecutivitatea eficientă* a parametrilor metodei. Pentru început a fost determinată mulțimea indicilor, care ordonează eficient mulțimea parametrilor  $\tau_k$  (2.63) și notată prin  $\theta_n$  [4].

Pașii algoritmului pentru crearea mulțimii de indici, aplicat în cadrul cercetării, sunt descriși succint în continuare.

Fie  $n \in N$  numărul minim de iterații necesar pentru calcularea soluției cu exactitatea prestabilită.

Au fost realizate următoarele treceri, de la mulțimea  $\theta_m$  la mulțimea  $\theta_{2m}$ , de la mulțimea  $\theta_{2m}$  la mulțimea  $\theta_{2m+1}$ :

- numărul  $n$  a fost reprezentat ca sumă a puterilor cu baza 2

$$n = 2^{k_1} + 2^{k_2} + \dots + 2^{k_s}, \quad k_j \leq k_{j-1} - 1, \quad j = 2, 3, \dots, s.$$

- după a fost calculată valoare

$$n_j = \sum_{i=1}^j 2^{k_i - k_j}, \quad j = 1, 2, \dots, s, \quad n_{s+1} = 2n + 1.$$

- mai apoi au fost construite mulțimile

$$\theta_{n_j} = \left\{ \theta_i^{(n_j)} = \theta_i^{(n_{j-1})}, \quad \theta_{n_j}^{(n_j)} = n_j, \quad i = 1, 2, \dots, n_j - 1 \right\}, \quad j = 1, 2, \dots, s \quad (2.64)$$

$$j = 1, \quad \theta_{n_1} = \{1\}, \quad m = 1$$

și următoarele mulțimi intermediare, dacă a fost satisfăcută relația  $[(n_{j+1} - 1)/4] \geq n_j$

$$\theta_{2m} = \left\{ \theta_{2i}^{(2m)} = 4m - \theta_i^{(m)}, \quad \theta_{2i-1}^{(2m)} = \theta_i^{(m)}, \quad i = 1, 2, \dots, m \right\}, \quad m = n_j, 2n_j, 4n_j, \dots, \left[ \left( \frac{n_{j+1}-1}{4} \right) \right] \quad (2.65)$$

dacă  $[(n_{j+1} - 1)/4] < n_j$ , calculele conform (2.65) nu au fost realizate și s-a trecut la următorul pas al algoritmului

- dacă  $j = s$  atunci mulțimea indicilor  $\theta_n$  este construită, în caz contrar, a fost calculată mărimea  $m = \frac{(n_{j+1}-1)}{2}$  și pentru ea a fost construită mulțimea

$$\theta_{2m} = \left\{ \theta_{2i}^{(2m)} = 4m + 2 - \theta_i^{(m)}, \quad \theta_{2i-1}^{(2m)} = \theta_i^{(m)}, \quad i = 1, 2, \dots, m \right\} \quad (2.66)$$

valoarea  $j$  a fost mărită cu o unitate, iar calculele au fost reluate, revenind la expresia (2.64).

La finalul execuției algoritmului descris mai sus a fost obținută mulțimea indicilor  $\theta_n$ , considerată cea mai eficientă, iar în baza acestor indici a fost ordonată mulțimea parametrilor metodei  $\mathfrak{M}_n$ , astfel a fost obținută consecutivitatea cea mai eficientă a parametrilor Cebîșev, notată  $\mathfrak{M}_n^{(\text{eficient})}$ .

Fiecărei metodă iterativă are limitele sale de aplicare, descrise în literatura de specialitate, dar nu clare în cazul problemei cercetării, neliniară și mixtă. Astfel, în cazul fiecărui model elaborat pe parcursul cercetării, a fost necesar de a determina limitele de aplicare ale metodei numerice în mod practic. În continuare, va fi descris, succint, procesul de determinare a limitelor pentru aplicarea Metodei Parametrilor Cebîșev pe Două Nivele.

Conform teoriei convergența metodei depinde de limitele spectrale  $\gamma_1$  și  $\gamma_2$ , care satisfac relația

$$\gamma_1 * (Bx, x) \leq (Ax, x) \leq \gamma_2 * (Bx, x).$$

În cazul Metodei Parametrilor Cebîșev pe Două Nivele

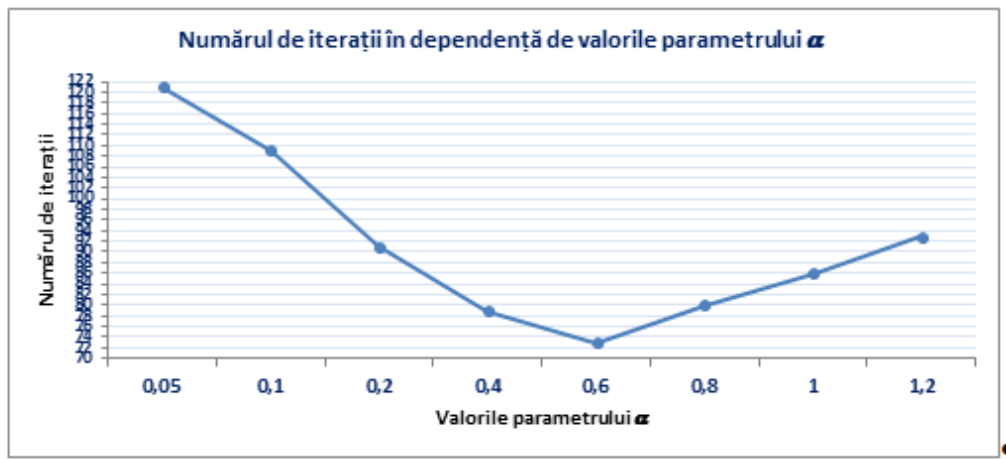
$$\gamma_2 \leq \lambda_{max}(A) = \frac{4}{h_{x_1}^2} \cos^2\left(\frac{\pi h_{x_1}}{2l_{x_1}}\right) + \frac{4}{h_{x_2}^2} \cos^2\left(\frac{\pi h_{x_2}}{2l_{x_2}}\right) \text{ și } \gamma_1 \leq \lambda_{min}(A) = \varepsilon \left(\frac{\pi^2}{l_{x_1}^2} + \frac{\pi^2}{l_{x_2}^2}\right)$$

S-a observat că  $\lambda_{max}$  este o valoare constantă, iar pentru  $\lambda_{min}$  trebuia de găsit valoarea optimală, în sensul minimului de iterații. Astfel, s-a considerat

$$\lambda_{min}(A) = \lambda_{min}^{(teoretic)} * \alpha = \varepsilon \left(\frac{\pi^2}{l_{x_1}^2} + \frac{\pi^2}{l_{x_2}^2}\right) * \alpha,$$

Parametrul  $\alpha^{optim}$  a fost găsit în mod practic, în baza rezultatelor experimentale asupra modelului numeric al diodei semiconductoare, cu aplicarea MPC2N. Valorile măsurate experimental cu identificarea celei optimale, pentru cazul MPC2N, sunt afișate în Tabelul 5.

Dependența numărului de iterații de valoarea parametrului  $\alpha$ , ce determină limita spectrală inferioară a Metodei Parametrilor Cebîșev pe două nivele este reprezentată în Figura 2.2



**Figura 2.2** *Dependența numărului iterațiilor de parametrul Metodei Cebîșev pe Două Nivele*

La prima etapă, din cadrul realizării algoritmului de modelare numerică a funcționalității diodei semiconductoare cu aplicarea MPC2N, au fost discretizate ecuațiile sistemului (1.17)-(1.19). A fost obținut sistemul algebric neliniar (2.1), (2.5), (2.9). După, au fost calculate valorile inițiale ale funcțiilor necunoscute conform relațiilor (2.10) cu  $V_a = 0$ , pe întreg domeniul de definiție  $\bar{\Omega}$  și notate prin  $\varphi^{(0)}$ ,  $\varphi_n^{(0)}$ ,  $\varphi_p^{(0)}$ .

La următoarea etapă a fost organizat un ciclu extern în cadrul căruia, la fiecare iterație cu pași mici, tensiunea aplicată la anod a fost mărită, iar valorile funcțiilor necunoscute au fost

recalculate în condițiile echilibrului termodinamic și notate prin  $\varphi^{(m+1)}$ ,  $\varphi_n^{(m+1)}$ ,  $\varphi_p^{(m+1)}$ , unde  $(m + 1)$  iterația curentă a ciclului extern.

În cadrul ciclului extern a fost organizat ciclul de rezolvare a sistemului algebric neliniar (2.1), (2.5), (2.9) având ordinul  $(3 * NN) \times (3 * MM)$  cu condițiile la frontieră (2.10)-(2.13). Valorile inițiale ale funcțiilor necunoscute în cadrul acestui ciclu au fost egalate cu valorile curente ale ciclului extern  $\varphi^{(n+1)} = \varphi^{(m+1)}$ ,  $\varphi_n^{(n+1)} = \varphi_n^{(m+1)}$ ,  $\varphi_p^{(n+1)} = \varphi_p^{(m+1)}$ , unde  $(n + 1)$  iterația curentă a ciclului cu  $n = 0$ .

În cadrul ciclului de rezolvare a sistemului algebric neliniar de ordinul  $(3 * NN) \times (3 * MM)$  au fost organizate trei cicluri interne, consecutive, pentru rezolvarea a câte un sistem algebric liniar de ordinul  $(NN - 1) \times (MM - 1)$ . Valorile inițiale ale funcțiilor necunoscute pentru fiecare ciclu intern au fost egalate cu valorile curente ale ciclului ce le conține  $\varphi^{(k+1)} = \varphi^{(n+1)}$ ,  $\varphi_n^{(k+1)} = \varphi_n^{(n+1)}$ ,  $\varphi_p^{(k+1)} = \varphi_p^{(n+1)}$ , unde  $(k + 1)$  iterația curentă a ciclului intern cu  $k = 0$ , iar  $(n + 1)$  iterația curentă al ciclului superior pentru rezolvarea sistemului de ordinul  $(3 * NN) \times (3 * MM)$ .

Sistemului algebric neliniar (2.1) i-a fost aplicată schema pe două nivele (2.18) cu parametri calculați conform (2.63) și ideea algoritmului lui Gummel pentru liniarizarea lui și separarea de sistemele (2.5) și (2.9). Ca necunoscută a rămas doar potențialul electrostatic ( $\varphi$ ), iar cvasi-potențialul lui Fermi pentru electroni ( $\varphi_n$ ) și cvasi-potențialul lui Fermi pentru goluri ( $\varphi_p$ ) au fost luate ca constante cu valori calculate la iterația precedentă. A fost obținut un sistem algebric liniar în necunoscuta potențialului electrostatic ( $\varphi$ ) de ordinul  $(NN - 1) \times (MM - 1)$ . Estimarea potențialului electrostatic ( $\varphi$ ) la iterația curentă  $(k + 1)$ , în nodurile interne ale rețelei ( $\Omega_h$ ), a fost realizată conform sistemului

$$\varphi_{ij}^{(k+1)} = \left( 1 - 2 \varepsilon \tau_{k+1} \left( \frac{1}{h_{x_1}^2} + \frac{1}{h_{x_2}^2} \right) \right) \varphi_{ij}^{(k)} + \tau_{k+1} \left( \frac{\varepsilon}{h_{x_1}^2} \varphi_{i+1,j}^{(k)} + \frac{\varepsilon}{h_{x_1}^2} \varphi_{i-1,j}^{(k)} + \frac{\varepsilon}{h_{x_2}^2} \varphi_{i,j+1}^{(k)} + \frac{\varepsilon}{h_{x_2}^2} \varphi_{i,j-1}^{(k)} + q \left( p_{ij}^{(k)} - n_{ij}^{(k)} + N_{ij}^{(k)} \right) \right), \text{ cu } \tau_{k+1} \in \mathfrak{M}_{k_0}^{(eficient)} \quad (2.67)$$

$$\text{aici } n_{ij}^{(k)} = n_i \exp\left(\frac{\varphi_{ij}^{(k)} - \varphi_{n,ij}^{(k)}}{\varphi_T}\right), \quad p_{ij}^{(k)} = n_i \exp\left(\frac{\varphi_{p,ij}^{(k)} - \varphi_{ij}^{(k)}}{\varphi_T}\right), \text{ pe } \Omega_h$$

Valoarea curentă a potențialului electrostatic ( $\varphi^{(k+1)}$ ) a fost calculată iterativ, în cadrul ciclului intern, până la atingerea exactității prestabilite.

La ieșirea din ciclul intern (2.67) au fost calculate valorile curente ale potențialului electrostatic ( $\varphi^{(k+1)}$ ) în nodurile de pe frontieră conform relațiilor (2.10), (2.11), iar valoarea

curentă a potențialului electrostatic din cadrul ciclului superior ( $\varphi^{(n+1)}$ ) a fost egalată cu valoarea curentă obținută în cadrul ciclului intern  $\varphi^{(n+1)} = \varphi^{(k+1)}$ .

Sistemului algebric neliniar (2.5) i-a fost aplicată schema pe două nivele (2.18) cu parametri calculați conform (2.63) și ideea algoritmului lui Gummel pentru liniarizarea lui și separarea de sistemele (2.1) și (2.9). Ca necunoscută a rămas doar cvasi-potențialul lui Fermi pentru electroni ( $\varphi_n$ ), iar potențialul electrostatic ( $\varphi$ ) și cvasi-potențialul lui Fermi pentru goluri ( $\varphi_p$ ) au fost luate ca constante cu valori calculate la iterația precedentă. A fost obținut un sistem algebric liniar în necunoscuta cvasi-potențialul lui Fermi pentru electroni ( $\varphi_n$ ) de ordinul  $(NN - 1) \times (MM - 1)$ . Estimarea cvasi-potențialului Fermi pentru electroni ( $\varphi_n$ ) la iterația curentă ( $k + 1$ ), în nodurile interne ale rețelei ( $\Omega_h$ ), a fost realizată conform sistemului

$$\varphi_{n\ ij}^{(k+1)} = \left( 1 + \mu_n \tau_{k+1} \left( \frac{n_{i+1/2,j}^{(k)} + n_{i-1/2,j}^{(k)}}{h_{x_1}^2} + \frac{n_{i,j+1/2}^{(k)} + n_{i,j-1/2}^{(k)}}{h_{x_2}^2} \right) \right) \varphi_{n\ ij}^{(k)} - \mu_n \tau_{k+1} \frac{n_{i+\frac{1}{2},j}^{(k)} \varphi_{n\ i+1,j}^{(k)} + n_{i-\frac{1}{2},j}^{(k)} \varphi_{n\ i-1,j}^{(k)}}{h_{x_1}^2} - \mu_n \tau_{k+1} \frac{n_{i,j+1/2}^{(k)} \varphi_{n\ i,j+1}^{(k)} + n_{i,j-1/2}^{(k)} \varphi_{n\ i,j-1}^{(k)}}{h_{x_2}^2} - \tau_{k+1} (R_{SRH,ij}^{(k)} + R_{AUG,ij}^{(k)}), \text{ cu } \tau_{k+1} \in \mathfrak{M}_{k_0}^{(eficient)} \quad (2.68)$$

aici  $n_{i+1/2,j}^{(k)}$ ,  $n_{i-1/2,j}^{(k+1)}$ ,  $n_{i,j+1/2}^{(k)}$ ,  $n_{i,j-1/2}^{(k+1)}$ , au fost calculate în seminodurile interne ale rețelei conform relațiilor (2.4).

Valoarea curentă a cvasi-potențialului Fermi pentru electroni ( $\varphi_n^{(k+1)}$ ) a fost calculată iterativ în cadrul ciclului intern, până la atingerea exactității prestabilite.

La ieșirea din ciclul intern (2.68) au fost calculate valorile curente ale cvasi-potențialului Fermi pentru electroni ( $\varphi_n^{(k+1)}$ ) în nodurile de pe frontieră, conform relațiilor (2.10),(2.12), iar valoarea curentă a cvasi-potențialului Fermi pentru electroni din cadrul ciclului superior ( $\varphi_n^{(n+1)}$ ) a fost egalată cu valoarea curentă obținută în cadrul ciclului intern  $\varphi_n^{(n+1)} = \varphi_n^{(k+1)}$ .

Sistemului algebric neliniar (2.9) i-a fost aplicată schema pe două nivele (2.18) cu parametri calculați conform (2.63), iar mai apoi ideea algoritmului lui Gummel pentru liniarizarea lui și separarea de sistemele (2.1) și (2.5). Ca necunoscută a rămas doar cvasi-potențialul lui Fermi pentru goluri ( $\varphi_p$ ), iar potențialul electrostatic ( $\varphi$ ) și cvasi-potențialul lui Fermi pentru electroni ( $\varphi_n$ ) au fost luate ca constante, cu valori calculate la iterația precedentă. A fost obținut un sistem algebric liniar în necunoscuta cvasi-potențialul lui Fermi pentru goluri ( $\varphi_p$ ) de ordinul  $(NN - 1) \times (MM - 1)$ . Estimarea cvasi-potențialului Fermi pentru goluri ( $\varphi_p$ ) la iterația curentă ( $k + 1$ ), în nodurile interne ale rețelei ( $\Omega_h$ ), a fost realizată conform sistemului

$$\varphi_{p\ ij}^{(k+1)} = \left( 1 - \mu_p \tau_{k+1} \left( \frac{p_{i+1/2,j}^{(k)} + p_{i-1/2,j}^{(k)}}{h_{x_1}^2} + \frac{p_{i,j+1/2}^{(k)} + p_{i,j-1/2}^{(k)}}{h_{x_2}^2} \right) \right) \varphi_{p\ ij}^{(k)} + \mu_p \tau_{k+1} \frac{p_{i+1/2,j}^{(k)} \varphi_{p\ i+1,j}^{(k)} + p_{i-1/2,j}^{(k)} \varphi_{p\ i-1,j}^{(k)}}{h_{x_1}^2} + \mu_p \tau_{k+1} \frac{p_{i,i+1/2}^{(k)} \varphi_{p\ i,j+1}^{(k)} + p_{i,i-1/2}^{(k)} \varphi_{p\ i,j-1}^{(k)}}{h_{x_2}^2} - \tau_{k+1} \left( R_{SRH,ij}^{(k)} + R_{AUG,ij}^{(k)} \right) \text{ cu } \tau_{k+1} \in \mathfrak{M}_{k_0}^{(eficient)} \quad (2.69)$$

aici  $p_{i+1/2,j}^{(k)}$ ,  $p_{i-1/2,j}^{(k+1)}$ ,  $p_{i,j+1/2}^{(k)}$ ,  $p_{i,j-1/2}^{(k+1)}$ , au fost calculate în seminodurile interne ale rețelei conform relațiilor (2.8).

Valoarea curentă a cvasi-potențialului Fermi pentru goluri  $(\varphi_p^{(k+1)})$  a fost calculată iterativ în cadrul ciclului intern, până la atingerea exactității prestabilite.

La ieșirea din ciclul intern (2.69) au fost calculate valorile curente ale cvasi-potențialului Fermi pentru goluri  $(\varphi_p^{(k+1)})$  în nodurile de pe frontieră conform relațiilor (2.10),(2.13), iar valoarea curentă a cvasi-potențialului Fermi pentru goluri din cadrul ciclului superior  $(\varphi_p^{(n+1)})$  a fost egalată cu valoarea curentă a ciclului intern  $\varphi_p^{(n+1)} = \varphi_p^{(k+1)}$ .

Ciclul de rezolvare a sistemului algebric neliniar (2.1), (2.5), (2.9) de ordinul  $((3 * NN) \times (3 * MM))$  a rulat până la obținerea exactității prestabilite pentru soluția  $\{\varphi^{(n+1)}, \varphi_n^{(n+1)}, \varphi_p^{(n+1)}\}$ .

La ieșirea din acest ciclu s-a trecut la următoarea iterație a ciclului extern în cadrul căreia valorile externe ale funcțiilor necunoscute au fost modificate  $\varphi^{(m+1)} = \varphi^{(n+1)}$ ,  $\varphi_n^{(m+1)} = \varphi_n^{(n+1)}$ ,  $\varphi_p^{(m+1)} = \varphi_p^{(n+1)}$ , cu  $(m + 1)$  iterația curentă a ciclului extern. În cadrul aceleiași iterații externe a fost mărită tensiunea aplicată la anod  $V_a$  și recalculat valorile variabilelor  $\{\varphi^{(m+1)}, \varphi_n^{(m+1)}, \varphi_p^{(m+1)}\}$  în condițiile echilibrului termodinamic. Procesul iterativ extern a rulat până când  $V_a$  a depășit valoarea 0,2 A.

A fost stabilită complexitatea MPC2N, teoretic. Analizând schema pe două nivele (2.18) cu parametrii calculați conform (2.63) și cele de determinare a ordinei lor optimale (2.64)-(2.66) s-a constatat că a fost necesar de realizat o operații de înmulțire a matricei la un vector și patru operații asupra vectorilor (de adunare, scădere, înmulțire la o constantă și împărțire la o constantă). Dacă notăm prin  $nn \times nn$  ordinul matricei  $A$  și luând în calcul că este o matrice predominant cinci diagonală, numărul total de operații la o iterație internă a fost calculat în baza următoarelor componente  $t_0 = 5nn$  drept numărul de operații scalare necesare pentru calcularea



valorilor inițiale,  $t_1 = 6nn$  numărul de adunări/scăderi ale scalarilor la realizarea unei iterații interne,  $t_2 = 6nn$  numărul de înmulțiri/împărțiri ale scalarilor la realizarea unei iterații interne.

Numărul minim de iterații necesar  $k_0$ , estimat teoretic în cazul MPC2N pentru determinarea soluției cu exactitatea prestabilită este

$$k_0 = [k_{teoretic}] + 1$$

$$k_{teoretic}(eroare) = \ln(error) / \ln(\rho) \approx 0,29 * NM^3 * \ln \frac{2}{eroare}$$

$$k_0(eroarea) = \left\lceil \frac{\ln(eroarea)}{\ln(\rho_0)} \right\rceil + 1 \approx \left\lceil 0,29 * NM^3 * \ln \frac{2}{eroarea} \right\rceil + 1 \quad (2.70)$$

unde  $NM$  este numărul de noduri ale rețelei pe o direcție. Astfel, numărul minim de iterații este proporțional cu cubul numărului de noduri pe o direcție, de unde rezultă că este proporțională cu  $nn\sqrt{nn}$ , unde  $nn$  numărul de necunoscute ale sistemului algebric.

Numărul total de operații necesar pentru calcularea soluției sistemului (2.1), (2.5), (2.9) este  $T = 36 * nn * k_0 + 19k_0 + 5 * nn$  operații.

Conform teoriei, viteza de convergență a MPC2N poate fi estimată conform relației

$$\rho = \frac{1-\xi}{1+\xi}, \text{ cu } \xi = \frac{\lambda_{min}(A)}{\lambda_{max}(A)} \quad (2.71)$$

unde  $\lambda_{max}$  și  $\lambda_{min}$  sunt valorile proprii ale lui  $A$ , calculate în baza relațiilor (2.59) și (2.60), respectiv.

Ordinul de convergență al MPC2N estimat teoretic este

$$\mathcal{O}(h_i^3), \text{ cu } h_i, \text{ pasul rețele} \quad (2.72)$$

Rezultate numerice, obținute în urma experimentelor asupra algoritmului modelării numerice a diodei semiconductoare cu utilizarea MPC2N:

a) Tabelul numărului mediu de iterații, efectuate pentru calculării soluțiilor cu exactitatea prestabilită de ordinul  $10^{-10}$ , obținut în urma măsurărilor experimentale asupra algoritmului numeric ce modelează matematic procesele neliniare în dioda semiconductoare (cazul MPC2N), implementat pe o rețea de noduri ( $16 \times 32$ ):

**Tabel 2.5: Numărul mediu de iterații. Cazul tripletului de necunoscute {  $\varphi$ ,  $\varphi_n$  și  $\varphi_p$  } cu aplicarea MPC2N**

nr. de iterații interne, în mediu, pentru $\varphi$	nr. de iterații interne, în mediu, pentru $\varphi_n$	nr. de iterații interne, în mediu, pentru $\varphi_p$	nr. total de iterații	nr. de iterații externe	Durata (minute)
4153	60	100	4313	20	188

b) Suprafețele funcțiilor  $\varphi$ ,  $\varphi_n$  și  $\varphi_p$ , construite în baza rezultatelor obținute la rezolvarea problemei diodei semiconductoare cu utilizarea MPC2N, sunt reprezentate grafic în Anexa 1.

MPC2N este o metodă eficientă având viteza de convergență mare. Un neajuns al acestei metode este faptul că la realizarea fiecărei iterații parametrii metodei trebuiesc recalculați, astfel se pierde în timp. Acest neajuns însă este neutralizat pe contul vitezei mari de convergență a metodei, astfel timpul necesar pentru efectuarea tuturor calculelor ajunge să fie eficient.

#### 2.4.2 Algoritmul modelării numerice cu aplicarea Metodei Parametrilor Cebîșev pe 3 Nivele (MPC3N)

Revenim la ecuația operatoriale  $Au = f$  cu  $A$  simetric și pozitiv definit în spațiul Hilbert  $H_D$ . La aplicarea schemei pe trei nivele pentru rezolvarea aceste ecuații aproximarea funcției necunoscute  $y_{k+1}$  a fost posibilă prin memorizarea altor două aproximări anterioare,  $y_k, y_{k-1}$ . A fost necesar de calculat și două valori inițiale  $y_0$  și  $y_1$ .

Prima valoare inițială  $y_0$  a fost calculată folosind relațiile (2.10) cu  $V_a = 0$ , iar a doua  $y_1$  a fost calculată rezolvând problema prin una dintre metodele iterative pe două nivele.

Schema standard pe trei nivele, implicită, poate fi scrisă sub forma

$$By_{k+1} = \alpha_{k+1}(B - \tau_{k+1}A)y_k + (1 - \alpha_{k+1})By_{k-1} + \alpha_{k+1}\tau_{k+1}f, \quad (2.73)$$

$$By_1 = (B - \tau_1A)y_0 + \tau_1f, \quad k = 1, 2, \dots, \quad y_0 \in H \quad (2.74)$$

unde  $y_0$  este aproximația inițială a soluției,  $B$  operator autoconjugat definit în spațiul Hilbert  $H$ , iar  $\alpha_{k+1}$  și  $\tau_{k+1}$  parametri iterativi ai metodei.

*Teorema 2.4 Fie  $A$  o matrice simetrică și pozitiv definită cu  $\lambda_{\max}(A) > \lambda_{\min}(A) > 0$ , valorile proprii ale ei. Fie dat numărul minim de iterații  $k_0$  necesar pentru calcularea soluției cu o exactitate prestabilită. Dintre metodele (2.73), (2.74) cea mai mică eroare  $\|y_{k_0} - u\|$  are cea pentru care*

$$\tau_{k+1} = \tau_0 = 2/(\lambda_{\min}(A) + \lambda_{\max}(A)), \quad \alpha_{k+1} = \frac{4}{(4 - \rho^2 \alpha_k)}, \quad k = 1, 2, \dots \quad \alpha_1 = 2 \quad (2.76)$$

$$\tau_0 = \frac{2}{\lambda_{\min}(A) + \lambda_{\max}(A)}, \quad \rho = \frac{1 - \xi}{1 + \xi}, \quad \xi = \frac{\lambda_{\min}(A)}{\lambda_{\max}(A)}, \quad k = 0, 1, \dots, n - 1 \quad (2.77)$$

Dacă parametrii metodei sunt aproximați conform relațiilor (2.76), (2.77) atunci estimarea erorii este posibilă conform relației

$$\|y_k - u\| \ll q_k \|y_0 - u\| \quad (2.78)$$

unde  $q_k = \frac{2\rho_0^k}{1 + \rho_0^{2k}}$ ,  $\rho_0 = \frac{1 - \sqrt{\xi}}{1 + \sqrt{\xi}}$ ,  $\xi = \frac{\lambda_{\min}(A)}{\lambda_{\max}(A)}$

În procesul determinării parametrilor schemei pe trei nivele apare problema calculării valorilor proprii. În practică, valoarea proprie minimală a fost determinată experimental, ca criteriu de optimalitate fiind ales viteza de convergență către soluția exactă a problemei.

Mai este de menționat faptul că analizând formulele de calcul ai parametrilor iterativi s-a observat că  $\tau_k$  nu depinde de numărul iterațiilor, iar parametrul  $\alpha_k$  calculat fiind ca limită cu  $k \rightarrow \infty$  devine o valoare constantă și poate fi calculată conform relației  $\alpha_k \approx \alpha = 1 + \rho_0^2$ .

Astfel, s-a trecut la următoarea schema iterativă pe trei nivele, staționară

$$\begin{aligned} By_{k+1} &= \alpha(B - \tau A)y_k + (1 - \alpha)By_{k-1} + \alpha\tau f, & k = 2, 3, \dots, \\ By_1 &= (B - \tau A)y_0 + \tau f, & \forall y_0 \in H \end{aligned} \quad (2.79)$$

$$\alpha = 1 + \rho_0^2 \quad \tau = \tau_0 = \frac{2}{\lambda_{\min}(A) + \lambda_{\max}(A)} \quad \rho_0 = \frac{1 - \sqrt{\xi}}{1 + \sqrt{\xi}} \quad \xi = \frac{\lambda_{\min}(A)}{\lambda_{\max}(A)} \quad (2.80)$$

La prima etapă, din cadrul modelării numerice a diodei semiconductoare cu aplicarea MPC3N a fost realizată discretizarea ecuațiilor diferențiale (1.17)-(1.19) și trecerea la sistemul algebric neliniar (2.1), (2.5), (2.9). Mai apoi, au fost calculate valorile inițiale ale funcțiilor necunoscute conform relațiilor (2.10) cu  $V_a = 0$  pe întreg domeniul de definiție  $\bar{\Omega}$  și notate prin  $\varphi^{(0)}$ ,  $\varphi_n^{(0)}$ ,  $\varphi_p^{(0)}$ . La această etapă, folosind o metodă iterativă pe două nivele, au fost calculate următoarele aproximații inițiale pentru funcțiilor necunoscute și notate  $\varphi^{(1)}$ ,  $\varphi_n^{(1)}$ ,  $\varphi_p^{(1)}$ .

La următoarea etapă a fost organizat un ciclu extern în cadrul căruia la fiecare iterație, cu pași mici, tensiunea aplicată la anod a fost mărită, iar valorile funcțiilor necunoscute au fost recalculat în condițiile echilibrului termodinamic și notate prin  $\{\varphi^{(m)}, \varphi_n^{(m)}, \varphi_p^{(m)}\}$  și  $\{\varphi^{(m+1)}, \varphi_n^{(m+1)}, \varphi_p^{(m+1)}\}$ , unde  $(m + 1)$  numărul iterației curente al ciclului extern.

În cadrul ciclului extern a fost organizat ciclul de rezolvare a sistemului algebric neliniar (2.1), (2.5), (2.9) de ordinul  $(3 * NN) \times (3 * MM)$  cu condițiile la frontieră (2.10)-(2.13). Valorile inițiale ale funcțiilor necunoscute, în cadrul acestui ciclu, au fost egalate cu valorile curente ale ciclului extern  $\varphi^{(n)} = \varphi^{(m)}$ ,  $\varphi^{(n+1)} = \varphi^{(m+1)}$ ,  $\varphi_n^{(n)} = \varphi_n^{(m)}$ ,  $\varphi_n^{(n+1)} = \varphi_n^{(m+1)}$  și  $\varphi_p^{(n)} = \varphi_p^{(m)}$ ,  $\varphi_p^{(n+1)} = \varphi_p^{(m+1)}$ , cu  $n = 0$ , iar  $(m + 1)$  iterația curentă a ciclului extern.

În cadrul ciclului de rezolvare a sistemului algebric neliniar de ordinul  $(3 * NN) \times (3 * MM)$  au fost organizate trei cicluri interne, consecutive, pentru rezolvarea a câte un sistem algebric liniar de ordinul  $(NN - 1) \times (MM - 1)$ . Valorile inițiale ale funcțiilor necunoscute, pentru fiecare ciclu intern, au fost egalate cu valorile curente ale ciclului comun acestor cicluri conform relațiilor  $\varphi^{(k)} = \varphi^{(n)}$ ,  $\varphi^{(k+1)} = \varphi^{(n+1)}$ ,  $\varphi_n^{(k)} = \varphi_n^{(n)}$ ,  $\varphi_n^{(k+1)} = \varphi_n^{(n+1)}$ ,  $\varphi_p^{(k)} = \varphi_p^{(n)}$ ,  $\varphi_p^{(k+1)} = \varphi_p^{(n+1)}$ , unde cu  $k = 0$ , iar  $(n + 1)$  iterația curentă a ciclului superior.

Sistemului algebric neliniar (2.1) i-a fost aplicată schema pe trei nivele (2.79) cu parametrii calculați conform relațiilor (2.80) și ideea algoritmului lui Gummel, pentru liniarizarea lui și separarea de sistemele (2.5) și (2.9), ca necunoscută rămânând doar potențialul electrostatic ( $\varphi$ ), iar cvasi-potențialul lui Fermi pentru electroni ( $\varphi_n$ ) și cvasi-potențialul lui Fermi pentru goluri ( $\varphi_p$ ) luate ca constante, cu valori calculate la iterațiile precedente. A fost obținut un sistem algebric liniar în necunoscuta potențialului electrostatic ( $\varphi$ ), de ordinul  $(NN - 1) \times (MM - 1)$ . Estimarea lui  $\varphi$  la iterația curentă ( $k + 1$ ), în nodurile interne ale rețelei ( $\Omega_h$ ), a fost realizată în baza sistemului

$$\varphi_{ij}^{(k+1)} = \alpha_{k+1} \left( \left( 1 - \tau_{k+1} \frac{2\varepsilon}{h_{x_1}^2} - \tau_{k+1} \frac{2\varepsilon}{h_{x_2}^2} \right) \varphi_{ij}^{(k)} + \tau_{k+1} \varepsilon \left( \frac{1}{h_{x_1}^2} \varphi_{i+1,j}^{(k)} + \frac{1}{h_{x_1}^2} \varphi_{i-1,j}^{(k)} + \frac{1}{h_{x_2}^2} \varphi_{i,j+1}^{(k)} + \frac{1}{h_{x_2}^2} \varphi_{i,j-1}^{(k)} \right) \right) + (1 - \alpha_{k+1}) \varphi_{ij}^{(k-1)} + \alpha_{k+1} \tau_{k+1} q \left( p_{ij}^{(k)} - n_{ij}^{(k)} + N_{ij}^{(k)} \right) \quad \text{pe } \Omega_h \quad (2.81)$$

cu  $\tau_{k+1}$ ,  $\alpha_{k+1}$ , din (2.80), iar  $n_{ij}^{(k)} = n_i \exp\left(\frac{\varphi_{ij}^{(k)} - \varphi_{n,ij}^{(k)}}{\varphi_T}\right)$ ,  $p_{ij}^{(k)} = n_i \exp\left(\frac{\varphi_{p,ij}^{(k)} - \varphi_{ij}^{(k)}}{\varphi_T}\right)$

Noua valoarea a potențialului electrostatic ( $\varphi^{(k+1)}$ ) a fost calculată iterativ, în cadrul unui ciclu intern, până la atingerea exactității prestabilite.

La ieșirea din ciclul intern (2.81) au fost calculate valorile curențe ale potențialului electrostatic ( $\varphi^{(k+1)}$ ) în nodurile de pe frontieră conform relațiilor (2.10),(2.11), iar valoarea curență a potențialului electrostatic din cadrul ciclului superior ( $\varphi^{(n+1)}$ ) a fost modificată conform relațiilor  $\varphi^{(n)} = \varphi^{(n+1)}$ ,  $\varphi^{(n+1)} = \varphi^{(k+1)}$ .

Sistemului algebric neliniar (2.5) i-a fost aplicată schema pe trei nivele (2.79) cu parametrii calculați conform relațiilor (2.80) și ideea algoritmului lui Gummel, pentru liniarizarea lui și separarea de sistemele (2.1) și (2.9), ca necunoscută rămânând doar cvasi-potențialul lui Fermi pentru electroni ( $\varphi_n$ ), iar potențialul electrostatic ( $\varphi$ ) și cvasi-potențialul lui Fermi pentru goluri ( $\varphi_p$ ) au fost luate ca constante, cu valori calculate la iterațiile precedente. A fost obținut un sistem algebric liniar în necunoscuta cvasi-potențialul lui Fermi pentru electroni ( $\varphi_n$ ) de ordinul  $(NN - 1) \times (MM - 1)$ . Estimarea lui ( $\varphi_n$ ) la iterația curentă ( $k + 1$ ), în nodurile interne ale rețelei ( $\Omega_h$ ), a fost realizată conform sistemului

$$\begin{aligned} \varphi_{n,ij}^{(k+1)} = & \alpha_{k+1} \left( \left( 1 + \frac{\mu_n \tau_{k+1}}{h_{x_1}^2} (n_{i+1/2,j}^{(k)} + n_{i-1/2,j}^{(k)}) + \frac{\mu_n \tau_{k+1}}{h_{x_2}^2} (n_{i,j+1/2}^{(k)} + n_{i,j-1/2}^{(k)}) \right) \varphi_{n,ij}^{(k)} - \right. \\ & \left. \frac{\mu_n \tau_{k+1}}{h_{x_1}^2} (n_{i+1/2,j}^{(k)} \varphi_{n,i+1,j}^{(k)} + n_{i-1/2,j}^{(k)} \varphi_{n,i-1,j}^{(k)}) - \frac{\mu_n \tau_{k+1}}{h_{x_2}^2} (n_{i,j+1/2}^{(k)} \varphi_{n,i,j+1}^{(k)} + n_{i,j-1/2}^{(k)} \varphi_{n,i,j-1}^{(k)}) \right) + \\ & (1 - \alpha_{k+1}) \varphi_{n,ij}^{(k-1)} + \alpha_{k+1} \tau_{k+1} (R_{SRH,ij}^{(k)} + R_{AUG,ij}^{(k)}), \quad i = \overline{2, NN-1}, \quad j = \overline{2, MM-1} \quad (2.82) \end{aligned}$$

cu  $\tau_{k+1}$  și  $\alpha_{k+1}$  din (2.80), iar  $n_{i+1/2,j}^{(k)}$ ,  $n_{i-1/2,j}^{(k+1)}$ ,  $n_{i,j+1/2}^{(k)}$ ,  $n_{i,j-1/2}^{(k+1)}$ , calculate în seminoduri interne ale rețelei, conform relațiilor (2.4).

Noua valoare a cvasi-potențialului lui Fermi pentru electroni ( $\varphi_n^{(k+1)}$ ) a fost calculată iterativ în cadrul unui ciclu intern, până la atingerea exactității prestabilite.

La ieșirea din ciclul intern (2.82) au fost calculate valorile funcției necunoscute  $\varphi_n^{(k+1)}$  în nodurile de pe frontieră conform relațiilor (2.10),(2.12). După, valoarea curentă a cvasi-potențialului lui Fermi pentru electroni din ciclul superior a fost modificată conform relațiilor  $\varphi_n^{(n)} = \varphi_n^{(n+1)}$ ,  $\varphi_n^{(n+1)} = \varphi_n^{(k+1)}$ .

Sistemului algebric neliniar (2.9) i-a fost aplicată schema pe trei nivele (2.79) cu parametri calculați conform relațiilor (2.80) și ideea algoritmului lui Gummel pentru liniarizarea lui și separarea de sistemele (2.1) și (2.5), ca necunoscută rămânând doar cvasi-potențialul lui Fermi pentru goluri ( $\varphi_p$ ), iar potențialul electrostatic ( $\varphi$ ) și cvasi-potențialul lui Fermi pentru electroni ( $\varphi_n$ ) au fost luate ca constante, cu valori calculate la iterațiile precedente. A fost obținut un sistem algebric liniar în necunoscuta cvasi-potențialul lui Fermi pentru goluri ( $\varphi_p$ ) de ordinul  $(NN-1) \times (MM-1)$ . Estimarea cvasi-potențialul lui Fermi pentru goluri ( $\varphi_p$ ) la iterația curentă ( $k+1$ ), în nodurile interne ale rețelei ( $\Omega_h$ ), a fost realizată conform sistemului

$$\begin{aligned} \varphi_{p,ij}^{(k+1)} = & \alpha_{k+1} \left( \left( 1 - \frac{\mu_p \tau_{k+1}}{h_{x_1}^2} (p_{i+1/2,j}^{(k)} + p_{i-1/2,j}^{(k)}) - \frac{\mu_p \tau_{k+1}}{h_{x_2}^2} (p_{i,j+1/2}^{(k)} + p_{i,j-1/2}^{(k)}) \right) \varphi_{p,ij}^{(k)} + \right. \\ & \left. \frac{\mu_p \tau_{k+1}}{h_{x_1}^2} (p_{i+1/2,j}^{(k)} \varphi_{p,i+1,j}^{(k)} + p_{i,j-1/2}^{(k)} \varphi_{p,i-1,j}^{(k)}) + \frac{\mu_p \tau_{k+1}}{h_{x_2}^2} (p_{i,j+1/2}^{(k)} \varphi_{p,i,j+1}^{(k)} + p_{i,j-1/2}^{(k)} \varphi_{p,i,j-1}^{(k)}) \right) + \\ & (1 - \alpha_{k+1}) \varphi_{p,ij}^{(k-1)} + \alpha_{k+1} \tau_{k+1} (R_{SRH,ij}^{(k)} + R_{AUG,ij}^{(k)}) \quad i = \overline{2, NN-1}, \quad j = \overline{2, MM-1} \quad (2.83) \end{aligned}$$

cu  $\tau_{k+1}$ ,  $\alpha_{k+1}$  din (2.95),  $p_{i+1/2,j}^{(k)}$ ,  $p_{i-1/2,j}^{(k+1)}$ ,  $p_{i,j+1/2}^{(k)}$ ,  $p_{i,j-1/2}^{(k+1)}$ , calculate în seminodurile interne ale rețelei conform relațiilor (2.8).

Noua valoare a cvasi-potențialul lui Fermi pentru goluri ( $\varphi_p^{(k+1)}$ ) a fost calculată iterativ în cadrul unui ciclu intern, până la atingerea exactității prestabilite.

La ieșirea din ciclul intern (2.83) au fost calculate valorile funcției necunoscute  $\varphi_p^{(k+1)}$  în nodurile de pe frontieră conform relațiilor (2.10),(2.13). Valoarea cvasi-potențialul lui Fermi pentru goluri din ciclul comun celor trei cicluri interne  $\varphi_p^{(n+1)}$  a fost modificată conform relațiilor  $\varphi_n^{(n)} = \varphi_n^{(n+1)}$ ,  $\varphi_n^{(n+1)} = \varphi_n^{(k+1)}$ .

Ciclul de rezolvare al sistemului algebric neliniar (2.1), (2.5), (2.9) de ordinul  $((3 * NN) \times (3 * MM))$  a decurs până când a fost atinsă exactitatea prestabilită pentru soluția  $\{\varphi^{(n+1)}, \varphi_n^{(n+1)}, \varphi_p^{(n+1)}\}$ .

La ieșirea din acest ciclu s-a trecut la următoarea iterație a ciclului extern în cadrul căreia valorile externe au fost modificate  $\varphi^{(m)} = \varphi^{(m+1)}$ ,  $\varphi^{(m+1)} = \varphi^{(n+1)}$ ,  $\varphi_n^{(m)} = \varphi_n^{(m+1)}$ ,  $\varphi_n^{(m+1)} = \varphi_n^{(n+1)}$ ,  $\varphi_p^{(m)} = \varphi_p^{(m+1)}$ ,  $\varphi_p^{(m+1)} = \varphi_p^{(n+1)}$ , unde  $(m + 1)$  este iterația curentă a ciclului extern. În cadrul aceleiași iterații externe a fost mărită tensiunea aplicată la anod  $V_a$ . Iar odată cu mărirea tensiunii  $V_a$  au fost recalculat valorile variabilelor  $\{\varphi^{(m+1)}, \varphi_n^{(m+1)}, \varphi_p^{(m+1)}\}$  în condițiile echilibrului termodinamic. Procesul iterativ extern a decurs până când  $V_a$  a depășit valoarea 0,2 A.

A fost determinată complexitatea MPC3N, teoretic. Analizând schema pe trei nivele (2.79) și expresiile de calcul ai parametrilor (2.80) a fost stabilit că pentru realizarea lor este necesar de realizat două operații de înmulțire a matricei la un vector și cinci operații aritmetice asupra vectorilor (de adunare, scădere, înmulțire la scalar și de împărțire la scalar). Dacă notăm prin  $nn \times nn$  ordinul matricei  $A$  și luând în calcul că este o matrice predominant cinci diagonală, numărul total de operații necesare la o iterație internă a fost calculat în baza următoarelor componente  $t_0 = 5nn$  drept numărul de operații scalare necesare pentru calcularea valorilor inițiale,  $t_1 = 10nn$  numărul de adunări/scăderi ale scalarilor la realizarea unei iterații interne,  $t_2 = 16nn$  numărul de înmulțiri/împărțiri ale scalarilor la realizarea unei iterații interne.

Numărul minim de iterații  $k_0$  necesar pentru calcularea soluției cu exactitatea prestabilită, teoretic, a fost estimat conform expresiei

$$k_0(eroarea) = \frac{\ln\left(\frac{eroarea}{2}\right)}{\ln(\rho_0)} \approx 0,35 * NM * \ln \frac{2}{eroarea} \quad (2.84)$$

unde  $NM$ , numărul de noduri ale rețelei pe o direcție. Astfel, numărul minim de iterații estimat în cazul aplicării MPC3N este proporțional cu numărului de noduri pe o direcție, rezultă că este proporțional cu numărul  $\sqrt{nn}$ , unde  $nn$  este numărul de necunoscute ale sistemului algebric.

Numărul total de operații necesar pentru calcularea soluției sistemului (2.1), (2.5), (2.9) este  $T = 78 * nn * k_0 + 5 * nn$  operații.

Conform teoriei, viteza de convergență a metodei iterative, notată cu  $\rho$ , în cazul MPC3N este

$$\rho = \frac{1-\xi}{1+\xi}, \text{ cu } \xi = \frac{\gamma_1}{\gamma_2}, \gamma_1 = \frac{8}{h_i^2} \sin^2 \frac{\pi h_i}{2l} \quad \gamma_2 = \frac{8}{h^2} \cos^2 \frac{\pi h_i}{2l} \quad (2.85)$$

unde  $h_i$  este pasul rețele,  $l$  lungimea domeniului de definiție pe o direcție,  $\gamma_1$  și  $\gamma_2$  sunt valorile proprii ale lui  $A$  maximală și minimală, respectiv.

Ordinul de convergență al MPC3N, estimat teoretic este

$$\mathcal{O}(h_i^4) \quad (2.86)$$

Rezultate numerice, obținute în urma experimentelor asupra algoritmului modelării numerice a diodei semiconductoare cu utilizarea MPC3N:

a) Tabelul numărului mediu de iterații, efectuate pentru calculării soluțiilor cu exactitatea prestabilită de ordinul  $10^{-10}$ , obținut în urma măsurărilor experimentale asupra algoritmului numeric ce modelează matematic procesele neliniare în dioda semiconductoare (cazul MPC3N), implementat pe o rețea de noduri ( $16 \times 32$ ):

**Tabel 2.6: Numărul mediu de iterații. Cazul tripletului de necunoscute  $\{\varphi, \varphi_n$  și  $\varphi_p\}$  cu aplicarea MPC3N**

nr. de iterații interne, în mediu, pentru $\varphi$	nr. de iterații interne, în mediu, pentru $\varphi_n$	nr. de iterații interne, în mediu, pentru $\varphi_p$	nr. total de iterații interne	nr. de iterații externe	Durata (minute)
4936	15509	123556	144001	21	40

b) Suprafețele funcțiilor  $\varphi$ ,  $\varphi_n$  și  $\varphi_p$ , construite în baza rezultatelor obținute la rezolvarea problemei diodei semiconductoare cu utilizarea MPC3N, sunt reprezentate grafic în *Anexa 1*.

MPC3N este o metodă eficientă cu viteza de convergență moderată, iar fiind o metodă staționară câștigă și în timp necesar pentru a calcula soluția cu exactitatea prestabilită.

## 2.5 Modelarea numerică a proceselor neliniare în dispozitivul semiconductor cu aplicarea metodelor iterative nestaționare prin redirectionări

La crearea modelelor numerice cu utilizarea schemelor iterative pe două nivele (2.18) unul dintre factorii ce a determinat eficacitatea acestora este determinarea parametrului optimal în cazul procesului iterativ staționar sau a șirului optimal de parametri iterativi  $\{\tau_k\}$  în cazul procesului nestaționar.

La crearea modelelor de simulare numerică a dispozitivului semiconductor, descrise anterior, parametrii au fost aleși conform criteriului de minim al *operatorului a k iterații* în spațiul energetic  $H_D$ , sau a minimumului normei *operatorului trecerii de la o iterație la alta*. Condiționalitatea de aplicare a acestor criterii a fost cunoașterea informației apriori despre operatorul schemei. Informațiile apriori au fost determinate în baza proprietăților operatorilor schemei  $A, B$  și  $D$

a) În cazul operatorilor conjugați în spațiul  $H_D$  informația apriori a însemnat condiția de echivalență energetică a operatorilor, adică determinarea constantelor  $\gamma_1, \gamma_2$  conform relației

$$\gamma_1 B \leq A \leq \gamma_2 B, \quad (2.87)$$

b) În cazul operatorilor neconjugați a însemnat determinarea constantelor  $\gamma_1, \gamma_2$  din relațiile

$$\gamma_1 D \leq DB^{-1}A, \quad (DB^{-1}Ax, B^{-1}Ay) \leq \gamma_2 (DB^{-1}Ay, y), \quad \gamma_1 > 0 \quad (2.88)$$

c) În cazul operatorilor neconjugați informația apriori a însemnat determinarea constantelor  $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ , unde  $\gamma_1$  și  $\gamma_2$ , constantele din relația (2.87), iar  $\gamma_3$  a fost determinată din relațiile

$$\|0,5(DB^{-1}A - A^*(B^*)^{-1}D)y\|_{D^{-1}}^2 \leq \gamma_3^2((Dy, y)) \quad (2.89)$$

sau

$$\|0,5(DB^{-1}A - A^*(B^*)^{-1}D)y\|_{D^{-1}}^2 \leq \gamma_3^2((DB^{-1}Ay, y)) \quad (2.90)$$

Calcularea constantelor  $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$  cu o exactitate prestabilită poate deveni o problemă destul de complicată, care trebuie rezolvată ca o problemă separată folosind metode numerice speciale.

Dacă informația apriori poate fi obținută cu un efort mic de calcule numerice și dacă este nevoie de o generalizare a soluției ecuației operatoriale  $Au = f$ , diversificând părțile stângi ale ei, atunci este rațional de a depune efort pentru a determina această informație. Cum și s-a procedat în cazul metodelor anterioare din acest capitol. Aceste modele pot fi recomandate în cazurile când timpul suplimentar folosit pentru determinarea informației apriori duce la micșorarea considerabilă a timpului necesar pentru calcularea soluției sistemului.

În cazurile când este necesar de a rezolva problema cu o aproximare inițială bună, iar calcularea constantelor  $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$  este un proces complicat și durabil atunci este recomandat să fie utilizate una dintre metodele iterative nestaționare cu redirectionări.

### 2.5.1 Metoda Gradientilor (MG)

Cazul metodelor iterative de tip nestaționar necesită informații apriori doar de tip general despre operatorii schemei. Având aproximațiile funcției căutate  $y_k, y_{k+1}$ , determinate conform



schemei pe două nivele (2.18), criteriul de bază aplicat la construirea parametrilor iterativi în cazul metodelor nestaționare este căutarea lui  $\tau_{k+1}$  conform condiției minimului normei erorii reziduuului ( $z_{k+1}$ ) în spațiul  $H$  cu  $z_{k+1} = y_{k+1} - u$ , unde  $u$  este soluția exactă a ecuației operatoriale  $Au = f$ .

În cazul schemelor iterative explicite ( $B = E$ ) trecerea de la o iterație la alta este realizată conform expresiei

$$y_{k+1} = y_k - \tau_{k+1}r_k, \quad r_k = Ay_k - f \quad (2.91)$$

Trebuie de menționat că pentru operatorii autoconjugăți pozitiv definiți, trecerea de la iterația  $y_k$  la  $y_{k+1}$  are loc în direcția  $-r_k$ , care coincide cu antigradientul pentru funcționala obiectiv  $(Ay, y)$ . Afirmatia poate fi argumentată astfel:

$$\begin{aligned} (A(y - u), y - u) &= (A(y - u), y) - (A(y - u), u) = (Ay, y) - (Au, y) + (Ay, u) + \\ (Au, u) &= (Ay, y) + (Au, u) \end{aligned} \quad (2.92)$$

Cum componenta  $(Au, u) > 0$  ea poate fi exclusă din funcționala de mai sus deoarece este constantă și nu influențează procesul de găsim a valorii minimale pentru anti-gradientul funcției obiectiv, care coincide cu direcția reziduuului  $-r_k$  în punctul  $y_k$ .

Astfel, pentru operatorii autoconjugăți și pozitiv definiți, trecerea de la iterația  $y_k$  la  $y_{k+1}$  are loc în direcția  $-r_k$ , care coincide cu antigradientul pentru funcționala obiectiv  $(Ay, y)$ .

Pentru cazul operatorilor neconjugăți și nepozitivi, trecerea de la iterația  $y_k$  la  $y_{k+1}$  are loc în direcția  $-r_k$  pentru funcționala obiectiv, obținută prin modificarea funcționalei  $(A(y - u), y - u)$  astfel argumentată:

$$\begin{aligned} (A(y - u), y - u) &= (A(y - u), y) - (A(y - u), u) = (Ay, y) - (Au, y) + (Ay, u) + \\ (Au, u) &= (Ay, y) - 2(Au, y) + (Au, u) \end{aligned} \quad (2.93)$$

Componenta  $(Au, u) > 0$  excluzând-o ca constantă ce nu influențează procesul de găsim a valorii minimale și substituind în expresia funcționalei de mai sus  $Au = f$ , obținem funcționala obiectiv pentru cazul operatorului neconjugat  $(Ay, y) - 2 * (f, y)$  al cărui antigradient coincide cu direcția reziduuului  $-r_k$ .

Astfel, pentru operatorii neconjugăți trecerea de la iterația  $y_k$  la  $y_{k+1}$  are loc în direcția  $-r_k$ , care coincide cu antigradientul pentru funcționala obiectiv  $(Ay, y) - 2(f, y)$ .

Este cunoscut faptul că în direcția antigradient are loc descreșterea maximală a funcționalei. Aceste metode se numesc metode ale descreșterii gradientului (MDG) sau pur și simplu Metodele Gradientului (MG). Aceleași nume au fost păstrate și pentru metodele iterative implicite.

După aplicarea schemei pe două nivele ecuației operatoriale  $Au = f$

$$B \frac{y_{k+1} - y_k}{\tau_{k+1}} + Ay_k = f, \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad y_0 \in H \quad (2.94)$$

algoritmul MG în cazul operatorului neconjugat  $A$ , aplicat pentru rezolvarea ei este

- Se calculează reziduu  $r_{k+1} = Ay_k - f$ ,  $k + 1$  fiind iterația curentă
- Se rezolvă ecuația  $B\omega_{k+1} = r_{k+1}$ , unde  $\omega_{k+1} = B^{-1}r_{k+1}$  este redirecționarea soluției.
- Se calculează valoarea parametrului  $\tau_{k+1} = \frac{(D\omega_{k+1}, z_{k+1})}{(D\omega_{k+1}, \omega_{k+1})}$   $k = 0, 1, 2, \dots$
- Se calculează noua aproximare a funcției necunoscute  $y_{k+1} = y_k - \tau_{k+1}\omega_{k+1}$ ,  $k = 0, 1, 2, \dots$

Valoarea lui  $z_{k+1}$  este necunoscută, ea este concretizată în dependență de alegerea operatorului  $D$  în fiecare caz aparte.

Ca argument al aplicării metodelor iterative nestaționare este și faptul că în cazul acestora nu este necesar de a cunoaște limitele spectrale ale operatorului  $A$ .

Estimarea erorii metodei se realizează conform relației

$$\|z_n\|_D \leq \rho^n \|z_0\|_D, \quad \rho = \min_{\tau} \|E - \tau C\| \quad (2.95)$$

unde  $C = D^{-1/2}(DB^{-1}A)D^{-1/2}$ .

Dacă  $\rho < 1$  atunci MG pe două straturi converge în  $H_D$ .

Pentru micșorarea normei erorii de  $1/\varepsilon$  ori este suficient de realizat numărul de iterații estimat de următoarea expresie  $n \geq n_0(\varepsilon)$ , unde  $n_0(\varepsilon) = \ln \varepsilon / \ln \rho$  (2.96)

Deci metoda gradientilor pe două straturi depinde de mărimea  $\rho$ , mărime ce determină viteza de convergență a metodei.

Exemple de estimare a lui  $\rho$ , în dependență de operatorii aleși  $A, B, D$  [15]

a) Dacă operatorul  $DB^{-1}A$ , autoconjugat în  $H$ , iar  $\gamma_1, \gamma_2$  sunt constantele din relația (2.87) atunci

$$\rho = \frac{(1-\xi)}{(1+\xi)}, \quad \xi = \frac{\gamma_1}{\gamma_2} \quad (2.97)$$

b) Dacă operatorul  $DB^{-1}A$  nu este conjugat în  $H$  și este satisfăcută condiția (2.88) atunci

$$\rho = \sqrt{1 - \xi}, \quad \xi = \gamma_1/\gamma_2 \quad (2.98)$$

c) Dacă operatorul  $DB^{-1}A$  nu este conjugat în  $H$  și este satisfăcută condiția (2.89) atunci

$$\rho = (1 - \xi)/(1 + \xi) \quad \xi = \frac{1 - \kappa \gamma_1}{1 + \kappa \gamma_2} \quad \kappa = \frac{\gamma_3}{\sqrt{\gamma_1 \gamma_2 + \gamma_3^2}} \quad (2.99)$$

Din cele menționate mai sus parametrii metodei  $\tau_{k+1}$  au fost determinați din condiția minimului erorii  $z_{k+1} = y_{k+1} - u$  în spațiul  $H_D$ .

Calea descrisă pentru determinarea minimului local nu este optimală deoarece ne-a interesat valoarea minimă globală și acest minim, în varianta optimală, a trebuit să fie determinat

în minim iterații. Găsirea minimului global cu ajutorul minimilor locale nu este cea mai optimă cale.

Astfel, a trebuit de rezolvat problema determinării parametrilor iterativi  $\tau_{k+1}$ , care ar realiza trecerea în  $k_0$  iterații de la  $y_0$  la  $y_{k_0}$ .

Aceași problemă a fost rezolvată și în cazul metodei parametrilor Cebîșev pe două straturi. A fost stabilit că viteză mai mare de convergență o are acea metodă pentru care parametrii sunt construiți la minimizarea operatorului delegat (a  $k_0$  iterații) decât a celui ce realizează trecerea de la o iterație la alta. Această proprietate au păstrat-o și metodele construite în baza metodelor iterative nestaționare cu redirectionări.

Metoda Gradientului converge încet deoarece direcțiile de căutare sunt ortogonale și se întâmplă ca pe parcursul executării iterațiilor direcțiile de căutare să se repete.

Au fost căutate  $k_0$  direcții  $d^{(0)}, d^{(1)}, \dots, d^{(k_0-1)}$  astfel încât soluția să fie găsită după exact  $k_0$  iterații.

### 2.5.2 Metoda Gradientilor Conjugati (MGC)

MGC este o metodă de optimizare neliniară, care pornește de la Metoda Direcțiilor Conjugate (MDG) și are ca scop obținerea minimului unei funcții  $nn$  dimensionale pentru care se pot calcula gradientii.

MDC descrisă în subcapitolul anterior are dezavantajul unei convergențe lente deoarece după fiecare pas noua direcție este modificată cu 90 de grade, astfel direcțiile de căutare ale soluției se pot repeta.

MGC a rezolvat problema obținerii minimului mai rapid, în comparație cu MDC. S-a dorit ca fiecare direcție de căutare să fie liniar independentă de toate direcțiile deja încercate pentru găsirea minimului funcției. Setul de direcții obținut a fost denumit set conjugat și a permis aflarea minimului unei funcții  $nn$  dimensionale în cel mult  $nn$  pași de căutare.

Căutarea începe cu o valoare inițială arbitrară a funcției necunoscute  $y_0$ , în direcția aleasă aleatoriu  $\omega_0$ .

În caz general, direcția inițială  $\omega_0$  se alege ca în cazul *Metodei Steepest Descent* (MDC). Noua aproximare  $y_1$  va reprezenta punctul de minim pe acea direcție de căutare. Procesul va continua până la calcularea  $y_{k_0}$ .

Fie că ecuației operatoriale  $Au = f$  i s-a aplicat schema pe trei nivele, pentru rezolvarea ei

$$By_{k+1} = \alpha_{k+1}(B - \tau_{k+1}A)y_k + (1 - \alpha_{k+1})By_{k-1} + \alpha_{k+1}\tau_{k+1}f_k \quad (2.100)$$

$$By_1 = (B - \tau_1A)y_0 + \tau_1f_k, \quad y_0 \in H \quad (2.101)$$

Algoritmul realizării MDC, cazul schemei pe trei nivele

$$\tau_{k+1} = \frac{(D\omega_k, z_k)}{(D\omega_k, \omega_k)}, k = 0, 1, \dots \quad (2.102)$$

$$\alpha_{k+1} = \left(1 - \frac{\tau_{k+1}}{\tau_k} \frac{(D\omega_k, z_k)}{(D\omega_{k-1}, z_{k-1})} \frac{1}{\alpha_k}\right)^{-1}, k = 1, 2, \dots \quad \alpha_1 = 1 \quad (2.103)$$

unde  $\omega_k = B^{-1}r_k$  este redirecționarea,  $r_k = Ay_k - f$  reziduul și  $z_k = y_k - u$  eroarea.

Remarca 2.2 Pentru calcularea parametrilor în cazul schemelor pe două nivele sau pe trei nivele este folosit același număr de operații.

Remarca 2.3 Alegerea parametrilor  $\alpha_{k+1}$ ,  $\tau_{k+1}$  conform formulelor (2.102), (2.103) asigură minimul reziduului  $z_k$  în cazul operatorilor autoconjugați și pozitiv definiți, pentru orice  $k$ .

Alte cazuri particulare ale Metodei Direcțiilor Conjugate pentru scheme cu trei nivele

a) Metoda Gradientilor Conjugați (MGC)

$$D = A \quad \gamma_1 B \leq A \leq \gamma_2 B, \quad \gamma_1 > 0, \quad A = A^* > 0, \quad B = B^* > 0$$

cu parametrii iterative calculați în baza formulelor

$$\tau_{k+1} = \frac{(D\omega_k, z_k)}{(D\omega_k, \omega_k)}, \quad \alpha_{k+1} = \left(1 - \frac{\tau_{k+1}}{\tau_k} \frac{(r_k, \omega_k)}{(r_{k-1}, \omega_{k-1})} \frac{1}{\alpha_k}\right)^{-1} \quad (2.104)$$

b) Metoda Reziduurilor Conjugate (MRC)

$$D = A^*A, \quad \gamma_1(Bx, Bx) \leq (Ax, Bx) \leq \gamma_2(Bx, Bx), \quad \gamma_1 > 0, \quad A^*B = A^*B$$

cu parametri metodei iterative calculați conform formulelor

$$\tau_{k+1} = \frac{(A\omega_k, r_k)}{(A\omega_k, \omega_k)}, \quad \alpha_{k+1} = \left(1 - \frac{\tau_{k+1}}{\tau_k} \frac{(A\omega_k, \omega_k)}{(A\omega_{k-1}, r_{k-1})} \frac{1}{\alpha_k}\right)^{-1} \quad (2.105)$$

c) Metoda Redirecționărilor Conjugate (MRC)

$$D = AB^{-1}A, \quad \gamma_1 B \leq A \leq \gamma_2 B, \quad \gamma_1 > 0, \quad A = A^* > 0, \quad B = B^* > 0$$

cu parametri metodei iterative calculați conform formulelor

$$\tau_{k+1} = \frac{(A\omega_k, \omega_k)}{(B^{-1}A\omega_k, A\omega_k)}, \quad \alpha_{k+1} = \left(1 - \frac{\tau_{k+1}}{\tau_k} \frac{(A\omega_k, \omega_k)}{(A\omega_{k-1}, \omega_{k-1})} \frac{1}{\alpha_k}\right)^{-1} \quad (2.106)$$

d) Metoda Erorilor Conjugate (MEC)

$$D = B_0, \quad B = (A^*)^{-1}B, \quad \gamma_1 B \leq A^*A \leq \gamma_2 B, \quad BB^* > 0$$

cu parametri metodei iterative calculați conform formulelor

$$\tau_{k+1} = \frac{(r_k, r_k)}{(A\omega_k, r_k)}, \quad \alpha_{k+1} = \left(1 - \frac{\tau_{k+1}}{\tau_k} \frac{(r_k, r_k)}{(r_{k-1}, r_{k-1})} \frac{1}{\alpha_k}\right)^{-1} \quad (2.107)$$

Remarca 2.4 MGC este o metodă eficientă pentru sistemele simetrice pozitiv definite.

Remarca 2.5 Dacă valorile proprii extreme ale matricei sunt bine separate convergența este observată cu o rată care crește pe iterație. Acest fenomen este explicat prin faptul că MGC tinde să elimine mai întâi componentele erorii în direcția vectorilor proprii

asociați cu valorile proprii extreme. După eliminare, metoda continuă ca și cum aceste valori proprii nu ar exista în sistemul dat, adică rata de convergență depinde de un sistem redus cu un număr de condiție (mult) inferior.

Remarca 2.6 Eficacitatea preconditionării cu reducerea numărului de condiții și cu separarea valorilor extreme, poate fi obținută prin studierea valorilor apropiate, asociate procesului Lanczo.

Remarca 2.7 Algoritmul este complet după cel puțin  $k$  iterații. Din acest motiv, se mai spune că metoda este semi-iterativă, șirul iterațiilor tinde către soluția exactă atunci când numărul iterațiilor tinde la infinit.

În practică metoda MGC este folosită pentru probleme atât de complicate încât nu ar fi fezabil să se execute toate cele  $nn$  iterații. De aceea, iterațiile în algoritm sunt executate într-un ciclu cu test și nu într-un ciclu cu contor.

### **2.5.3 Algoritmul modelării numerice a proceselor neliniare în dispozitivul semiconductor cu aplicarea Metodei Gradientilor Conjugați (MGC)**

La prima etapă, în cadrul modelării numerice a proceselor neliniare în dioda semiconductoră cu aplicarea MGC, a fost realizată discretizarea ecuațiilor diferențiale (1.17)-(1.19) și trecerea la sistemul algebric neliniar (2.1), (2.5), (2.9). Mai apoi, au fost calculate valorile inițiale ale funcțiilor necunoscute conform relațiilor (2.10) cu  $V_a = 0$ , pe întreg domeniul de definiție  $\bar{\Omega}$  și notate prin  $\varphi^{(0)}$ ,  $\varphi_n^{(0)}$ ,  $\varphi_p^{(0)}$ .

La următoarea etapă a fost organizat un ciclu extern în cadrul căruia, la fiecare iterație, cu pași mici, tensiunea aplicată la anod a fost mărită, iar valorile funcțiilor necunoscute au fost recalculat în condițiile echilibrului termodinamic și notate prin  $\varphi^{(m+1)}$ ,  $\varphi_n^{(m+1)}$ ,  $\varphi_p^{(m+1)}$ , unde  $m + 1$  este numărul iterației curente a ciclului extern.

În cadrul ciclului extern a fost organizat ciclul de rezolvare a sistemului algebric neliniar (2.1), (2.5), (2.9) de ordinul  $(3 * NN) \times (3 * MM)$  cu condițiile la frontieră (2.10)-(2.13). Valorile inițiale ale funcțiilor necunoscute în cadrul acestui ciclu au fost egalate cu valorile curente ale ciclului extern  $\varphi^{(n+1)} = \varphi^{(m+1)}$ ,  $\varphi_n^{(n+1)} = \varphi_n^{(m+1)}$ ,  $\varphi_p^{(n+1)} = \varphi_p^{(m+1)}$  cu  $n = 0$ .

În cadrul ciclului de rezolvare a sistemului algebric neliniar de ordinul  $(3 * NN) \times (3 * MM)$  au fost organizate trei cicluri interne consecutive, pentru rezolvarea a câte un sistem algebric liniar de ordinul  $((NN - 1)) \times ((MM - 1))$ . Valorile inițiale ale funcțiilor necunoscute la intrarea în fiecare ciclu intern au fost egalate cu valorile curente ale ciclului superior  $\varphi^{(k+1)} =$

$\varphi^{(n+1)}$ ,  $\varphi_n^{(k+1)} = \varphi_n^{(n+1)}$ ,  $\varphi_p^{(k+1)} = \varphi_p^{(n+1)}$ , cu  $k = 0$  și  $(n + 1)$  iterația curentă a ciclului superior.

Pentru rezolvarea sistemului algebric neliniar (2.1) de ordinul  $(NN - 1) \times (MM - 1)$  și calcularea potențialului electrostatic la iterația curentă ( $\varphi^{(k+1)}$ ) au fost parcurși pașii descriși în continuare.

Calcularea reziduului inițial

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

Determinarea redirecționării inițiale

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

Determinarea valorii intermediare  $t_k$

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

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 ( $k + 1$ )

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

$$i = \overline{1, NN + 1}, \quad j = \overline{1, MM + 1}$$

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

Calcularea componentelor potențialului electrostatic  $\varphi$  la iterația ( $k + 1$ )

$$\varphi_{ij}^{(k+1)} = \varphi_{ij}^{(k)} + \alpha^{(k+1)} \omega_{ij}^{(k)}, \quad i = \overline{2, NN}, \quad j = \overline{2, MM}.$$

În nodurile de pe frontieră valorile potențialului electrostatic au fost approximate conform sistemului (2.10),(2.11).

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

$$r_{ij}^{(k+1)} = r_{ij}^{(k)} - \alpha^{(k+1)} s_{ij}^{(k+1)}, \quad i = \overline{1, NN + 1}, \quad j = \overline{1, MM + 1},$$

Calcularea valorilor intermediare

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

Calcularea redirecționării la iterația curentă

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

Revenirea la verificarea normei reziduului pentru potențialul electrostatic.

La ieșirea din ciclul intern valoarea potențialului electrostatic a ciclului superior ( $\varphi^{(n+1)}$ ) a fost egalată cu valoarea potențialului electrostatic obținută în cadrul ciclului intern  $\varphi^{(n+1)} = \varphi^{(k+1)}$ , unde  $(n + 1)$  este numărul iterației curente a ciclului ce rezolvă sistemul de ordinul  $(3 * NN) \times (3 * MM)$ .

Pentru rezolvarea sistemului algebric linear (2.5) de ordinul  $(NN - 1) \times (MM - 1)$  și calcularea valorii curente a cvasi-potențialului Fermi pentru electroni  $\varphi_n^{(k+1)}$  au fost parcurși pașii descriși în continuare.

Calcularea reziduului inițial pentru  $k = 0$

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

Determinarea redirectionării inițiale

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

Determinarea valorii intermediare

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

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 ( $k + 1$ )

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

Calcularea valorilor intermediare la iterația curentă ( $k+1$ )

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

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

$$\varphi_{n,ij}^{(k+1)} = \varphi_{n,ij}^{(k)} + \alpha^{(k)} \omega_{ij}^{(k)}, \quad i = \overline{2, NN}, \quad j = \overline{2, MM},$$

Aproximarea valorilor cvasi-potențialului lui Fermi  $\varphi_n$  în nodurile de pe frontieră conform sistemelor (2.10),(2.12).

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

$$r_{n,ij}^{(k+1)} = r_{n,ij}^{(k+1)} - \alpha^{(k)} s_{n,ij}^{(k)}, \quad i = \overline{1, NN + 1}, \quad j = \overline{1, MM + 1}.$$

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 redirectionare 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 reziduuului pentru cvasi-potențialul lui Fermi, cazul electronilor.

La ieșirea din ciclul intern  $\varphi_n^{(n+1)} = \varphi_n^{(k+1)}$ , unde ( $n + 1$ ) este numărul iterației curente a ciclului ce rezolvă sistemul de ordinul  $(3 * NN) \times (3 * MM)$ .

Pentru rezolvarea sistemului algebric linear (2.9) de ordinul  $(NN - 1) \times (MM - 1)$  și calcularea valorii curente a cvasi-potențialul lui Fermi pentru goluri  $\varphi_p^{(k+1)}$  au fost parcurși pașii descriși în continuare.

Calcularea reziduuului inițial pentru  $k = 0$

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

Determinarea redirectionării inițiale

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

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 ( $k + 1$ )

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

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 ( $\varphi_p$ ) la iterația curentă ( $k + 1$ )

$$\varphi_{p,ij}^{(k+1)} = \varphi_{p,ij}^{(k)} + \alpha_p^{(k)} \omega_{ij}^{(k)}, \quad i = \overline{1, NN + 1}, \quad j = \overline{1, MM + 1}$$

Aproximarea valorile cvasi-potențialului lui Fermi pentru goluri  $\varphi_p^{(k+1)}$  în nodurile de pe frontieră conform sistemelor (2.10),(2.13), la iterația curentă ( $k + 1$ ).

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

$$r_{p,ij}^{(k+1)} = r_{p,ij}^{(k+1)} - \alpha_p^{(k)} s_{p,ij}^{(k)}, \quad i = \overline{1, NN + 1}, \quad j = \overline{1, MM + 1},$$

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  $\varphi_p$

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

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

La ieșirea din ciclul intern  $\varphi_p^{(n+1)} = \varphi_p^{(k+1)}$ , unde ( $n + 1$ ) este iterația curentă a ciclului superior ce rezolvă sistemul de ordinul  $(3 * NN) \times (3 * MM)$ .

Ciclul de rezolvare al sistemului algebric neliniar (2.1), (2.5), (2.9) de ordinul  $((3 * NN) \times (3 * MM))$  va rula până când soluția sistemului  $\{\varphi^{(n+1)}, \varphi_n^{(n+1)}, \varphi_p^{(n+1)}\}$  va fi calculată cu exactitatea prestabilită.

La ieșirea din acest ciclu s-a trecut la următoarea iterație a ciclului extern în cadrul căreia valorile externe ale funcțiilor necunoscute au fost modificate  $\varphi^{(m+1)} = \varphi^{(n+1)}$ ,  $\varphi_n^{(m+1)} = \varphi_n^{(n+1)}$ ,  $\varphi_p^{(m+1)} = \varphi_p^{(n+1)}$ , cu ( $m + 1$ ) iterația curentă a ciclului extern. În cadrul aceleiași iterații externe a fost mărită tensiunea aplicată la anod  $V_a$  și recalculat valorile variabilelor  $\{\varphi^{(m+1)}, \varphi_n^{(m+1)}, \varphi_p^{(m+1)}\}$  în condițiile echilibrului termodinamic conform relațiilor (2.10). Procesul iterativ extern a decurs până când  $V_a$  a depășit valoarea 0,2 A.

A fost stabilită complexitatea MGC, teoretic. Analizând algoritmi metodei, descriși mai sus, s-a stabilit că pentru realizarea unei iterații interne cu aplicarea MGC au fost efectuate o operație de înmulțire a matricei la un vector și nouă operații aritmetice cu vectori (de adunarea, scăderea, înmulțire la o constantă, împărțire la o constantă). Dacă notăm prin  $nn \times nn$  ordinul

matricei  $A$  și luând în calcul că este o matrice predominant cinci diagonală, numărul total de operații la o iterație a fost calculat în baza următoarelor componente  $t_0 = 5nn^2 + 15nn - 3$  drept numărul de operații scalare necesare pentru calcularea valorilor inițiale,  $t_1 = nn^2 + 3nn - 2$  numărul de adunări/scăderi ale scalarilor la realizarea unei iterații interne și  $t_2 = n^2 + 6n + 2$  numărul de înmulțiri/împărțiri ale scalarilor la realizarea unei iterații interne.

Ordinul de convergență al MGC, estimat teoretic, este

$$\mathcal{O}(h_i^2) \quad (2.108)$$

Rezultate numerice, obținute în urma experimentelor asupra algoritmului modelării numerice a diodei semiconductoare cu utilizarea MGC:

a) Tabelul numărului mediu de iterații, efectuate pentru calculării soluțiilor cu exactitatea prestabilită de ordinul  $10^{-10}$ , obținut în urma măsurărilor experimentale asupra algoritmului numeric ce modelează matematic procesele neliniare în dioda semiconductoare (cazul MRS), implementat pe o rețea de noduri ( $16 \times 32$ ):

**Tabel 2.7: Numărul mediu de iterații. Cazul tripletului de necunoscute  $\{\varphi, \varphi_n$  și  $\varphi_p\}$  cu aplicarea MGC**

nr. de iterații interne, în mediu, pentru $\varphi$	nr. de iterații interne, în mediu, pentru $\varphi_n$	nr. de iterații interne, în mediu, pentru $\varphi_p$	nr. total de iterații	nr. de iterații externe	Durata (ore)
182	392	151591300	151591874	20	144

b) Suprafețele funcțiilor  $\varphi$ ,  $\varphi_n$  și  $\varphi_p$ , construite în baza rezultatelor obținute experimental la rezolvarea problemei diodei semiconductoare cu utilizarea MGC, sunt prezentate grafic în *Anexa 1*.

Metoda MGC aplicată la modelarea matematică a proceselor neliniare în dioda semiconductoare, cazul modelului matematic Drift-Diffusion, în varianta setului de funcții necunoscute  $\{\varphi, \varphi_n, \varphi_p\}$ , s-a dovedit a fi una lentă, mai lentă chiar și decât MIS. Dar, s-a observat că procesul durează mult pentru realizarea primei iterații externe cu  $V_a = 0.02$ . La următoarea iterație, cu mărirea tensiunii aplicată la anod, procesul de calculare a soluției a durat secunde. În concluzie, se poate de afirmat că metoda depinde mult de alegerea aproximării inițiale a funcțiilor necunoscute pentru realizarea procesului iterativ și obținerea soluției cu o anumită exactitate.

Pentru compararea eficienței tuturor algoritmilor elaborați și descriși în acest capitol au fost folosiți următorii indicatori: 1) *numărul de operații aritmetice necesare pentru calcularea unei noi aproximări a funcțiilor necunoscute la o iterație*, 2) *numărul mediu de iterații interne*,

3) numărul mediu de iterații externe, 4) timpul mediu necesar pentru realizarea experimentului numeric, 5) ordinul de convergență al metodei.

Rezultatele comparării sunt expuse în următorul tabel

**Tabel 2.8: Numărul mediu de iterații. Cazul tripletului de necunoscute  $\{\varphi, \varphi_n$  și  $\varphi_p\}$  pentru fiecare metodă iterativă aplicată în Capitolul 2.**

Modelul simulării	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	$O(h^1)$
<b>MPC2</b>	<b>36nn+19</b>	<b>4313</b>	<b>20</b>	<b>188</b>	<b><math>O(h^3)</math></b>
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,  $k_0$  numărul mediu de iterații interne,  $h$  pasul rețelei utilizată pentru discretizarea ecuațiilor modelului matematic.

## 2.6 Concluzii la capitolul 2

Când vorbim de modelarea numerică a dispozitivelor semiconductoare vorbim de fapt de o modelare fizică cu instrumente matematice.

Modelele fizice stau la baza alcătuirii ecuațiilor care descriu funcționarea dispozitivelor semiconductoare active. Rezolvarea lor cu anumite aproximații conduc la soluții (modele) analitice, folosite în modelarea numerică. În cadrul acestui capitol, la modelarea dispozitivului semiconductor au fost folosite modelul fizic al dispozitivului semiconductor (2.1)-(2.3) și soluții analitice ale acestuia (2.4)-(2.7).

Utilizarea în cadrul simulării a mai multor metode numerice pentru rezolvarea sistemelor algebrice obținute a condus la crearea mai multor algoritmi de modelare numerică a proceselor neliniare în dioda semiconductoare. Datele acumulate în cadrul experimentelor asupra modelelor numerice elaborate a făcut posibil de a-l identifica pe cel mai eficient.

Metoda lui Cebîșev pe două straturi, parametri iterativi  $\tau_k$  ai căreia sunt legați de calcularea rădăcinilor polinomului lui Cebîșev, din cauza necesității de a efectua un volum mare de calcule cu valori ale căror număr de zecimale este limitat, devine instabilă, cauza fiind creșterea rapidă a erorii. Pentru înlăturarea efectului de instabilitate ale calculelor s-a aplicat ordonarea parametrilor metodei, conform algoritmului descris în Subcapitolul 2.3.1. Astfel s-a obținut stabilitatea calculelor în cadrul experimentelor asupra modelului numeric creat și calcularea unei soluții cu o exactitate prestabilită ce tinde către soluția exactă. Un fapt ce ar trebui menționat este că cele mai multe calcule sunt efectuate în cadrul iterației pentru

determinarea primei aproximări a soluției. Următoarele aproximări necesitănd un număr cu mult mai mic de iterații. În concluzie se poate de afirmat că algoritmul modelării numerice cu aplicarea MPC2N este sensibil la valoarea inițială. Chiar și în condițiile unei valori inițiale arbitrare eficacitatea modelului numeric este bună și este recomandat spre aplicarea lui în practică, în cazul problemei dispozitivelor semiconductoare.

Algoritmul de modelare numerică a proceselor în dioda semiconductoare creat cu aplicarea MPC3N are avantaje și dezavantaje sale. Modelul este stabil în calcule, viteza de convergență este bună și spre deosebire de MPC2N nu necesită optimizarea ordinii parametrilor metodei  $\tau_k$  la fiecare iterație. Încă un plus al algoritmului este că necesită un volum cu mult mai mic de calcule, în comparație cu metoda lui Cebîșev pe două straturi, astfel fiind necesar timp mai puțin pentru realizarea lui. Dar numărul de iterații interne este cu mult mai mare. Algoritmul este recomandat spre utilizarea practică având o eficiență satisfăcătoare în cazul dispozitivelor semiconductoare.

Algoritmii de modelare numerică cu aplicarea metodelor iterative triunghiulare s-au dovedit a fi unii dintre cei mai eficienți și anume modelul cu utilizarea Metodei Relaxării Superioare. Posibil, factorul decizional al convergenței atât de rapide este simetria matricei sistemului, care are loc în cazul utilizării modelului matematic Drift-Diffusion și a setului de variabile utilizat: potențialul electrostatic și a cvasi-potențialelor lui Fermi pentru electroni și goluri.

Scopul cercetării a fost elaborarea algoritmilor ce modelează numeric procesele neliniare în dispozitivele semiconductoare și identificarea celor mai eficienți.

În cadrul acestui capitol au fost descriși șase algoritmi elaborați, cu implementarea lor prin crearea softului corespunzător și testării acestora. Toate șase modele numerice au avut la bază modelul matematic Drift-Diffusion pentru semiconductoare. Parametri de intrare în cazul tuturor algoritmilor realizați au fost aceiași. Aceleași tehnici de discretizare au fost aplicate în cazul fiecărui model și anume diferențele finite. Sistemul algebric neliniar, în cazul tuturor modelelor, a fost liniarizat folosind ideea algoritmului lui Gummel. Toate modelele au fost executate pe aceeași platformă de calcul (limbaj de programare și sistem de calcul). Astfel au fost create suficiente condiții de echitabilitate întru o comparare corectă a algoritmilor de modelare numerică a proceselor neliniare în dioda semiconductoare.

În concluzie, analizând datele din **Tabelul 2.8**, ca cei mai eficienți algoritmi de modelare numerică a dispozitivului semiconductor, în cazul modelului matematic Drift-Diffusion și a setului de funcții necunoscute  $\{\varphi, \varphi_n, \varphi_p\}$ , unde  $\varphi$  este potențialul electrostatic,  $\varphi_n$  și  $\varphi_p$  sunt

quasi-potențialele lui Fermi pentru electroni și goluri, respectiv, au fost identificate modelul cu aplicarea Metodei Super Relaxări, având cea mai mare viteză de convergență către soluția exactă și modelul cu aplicarea parametrilor Cebîșev pe două straturi cu o viteză bună de convergență, care diferă mult de cea presupusă teoretic și care la o alegere reușită a valorii inițiale ar duce la creșterea eficacității ei, mai bună chiar decât cea a Metodei Super Relaxări.

### 3 MODELAREA MATEMATICĂ A PROCESELOR NELINIARE ÎN DISPOZITIVUL SEMICONDUCTOR PRIN POTENȚIALUL ELECTROSTATIC ȘI CONCENTRAȚII ALE SARCINILOR

#### 3.1 Discretizarea ecuațiilor în derivate parțiale cu aplicarea diferențelor finite și a schemei lui Scharfetter Gummel

În Capitolul 2 au fost creați șase algoritmi de modelare numerică a proceselor neliniare în dioda semiconductoare având ca bază modelul matematic drift-diffusion, formulat în variabilele potențialului electrostatic ( $\varphi$ ), cvasi-potențialul lui Fermi pentru electroni ( $\varphi_n$ ) și a cvasi-potențialul lui Fermi pentru goluri ( $\varphi_p$ ). Scopul cercetării a fost crearea algoritmilor de modelare numerică a dispozitivului semiconductor și identificarea celor mai eficienți. Astfel, în Capitolul 3 vor fi descriși alți șase algoritmi cu aplicarea aceluiași model matematic, dar formulat în baza unui alt set de variabile.

În cadrul Capitolului 3, la modelarea proceselor neliniare în dioda semiconductoare ca model matematic a fost folosit sistemul de ecuații în derivate parțiale neliniare (1.17)-(1.19) cu soluțiile analitice ale acestora (1.23),(1.24) și condițiile la frontieră (1.39), (1.40), având ca variabile sistemul de funcții  $\{\varphi, n, p\}$ , unde  $\varphi$  este potențialului electrostatic,  $n$  concentrația de electroni și  $p$  concentrația de goluri.

Problema (1.17)-(1.19) cu condițiile la frontieră (1.39), (1.40) este o problemă mixtă având pe porțiunea de frontieră  $\Gamma_D$  definite condițiile lui Dirichlet, iar pe porțiunea de frontieră  $\Gamma_N$  definite condițiile lui Neumann.

Pentru problema (1.17)-(1.19) condițiile inițiale au forma (1.39) pe întreg domeniul de definiție  $\bar{\Omega}$  cu  $V_a = 0$ . Aceste valori au fost folosite ca aproximații inițiale ale variabilelor sistemului (1.17)-(1.19) pe întreg domeniu de definiție  $\bar{\Omega}$  în procesul iterativ, cu mărirea treptată a tensiunii aplicată la anod din exterior.

Eta de început, la crearea modelelor numerice pentru problema diodei semiconductoare a fost realizarea schemelor cu diferențe.

Problema (1.17)-(1.19) cu condițiile la frontieră (1.39), (1.40) a fost discretizată utilizând schema cu diferențe finite și cea a lui Scharfetter Gummel.

Pe domeniul continuu de definiție a problemei (Figura 1.1) a fost introdusă o grilă cu pașii  $h_{x_1}$  și  $h_{x_2}$ . Astfel a fost obținută o rețea de noduri interne notată prin  $\Omega_h = \{(x_1^{(i)}, x_2^{(j)}) \mid i = 2, \dots, NN, j = 2, \dots, MM\}$ , cu  $x_1^{(i)} = (i - 1) * h_{x_1}$  și  $x_2^{(j)} = (j - 1) * h_{x_2}$ . Prin  $\bar{\Omega}_h = \{(x_1^{(i)}, x_2^{(j)}) \mid i = 1, \dots, NN + 1, j = 1, \dots, MM + 1\}$  a fost notată mulțimea tuturor nodurilor (nodurile interne și cele de pe frontieră) cu  $\bar{\Omega}_h = \Omega_h \cup \Omega_D \cup \Omega_N$ . Aici

$\Omega_D$  este mulțimea nodurilor ce acoperă porțiunea de frontieră  $\Gamma_D$  la care sunt conectați electrozii și pe care sunt definite condițiile la frontieră Dirichlet, iar  $\Omega_N$  este mulțimea de noduri ce acoperă porțiunea de frontieră rămasă  $\Gamma_N$  și pe care sunt definite condițiile la frontieră Neumann.

La discretizarea ecuației în derivate parțiale neliniară (1.17), în nodurile interne ale rețelei ( $\Omega_h$ ), au fost folosite diferențele finite. Astfel a fost obținut următorul sistem algebric de ordinul  $(NN - 1) \times (MM - 1)$

$$2\varepsilon \left( \frac{1}{h_{x_1}^2} + \frac{1}{h_{x_2}^2} \right) \varphi_{ij} - \frac{\varepsilon}{h_{x_1}^2} (\varphi_{i+1,j} + \varphi_{i-1,j}) - \frac{\varepsilon}{h_{x_2}^2} (\varphi_{i,j+1} + \varphi_{i,j-1}) = q(p_{ij} - n_{ij} + N_{ij}) \quad (3.1)$$

cu  $i = \overline{2, NN}$   $j = \overline{2, MM}$

Pentru discretizarea ecuației în derivate parțiale și neliniară (1.18), ca prim pas au fost folosite diferențele finite pentru ecuația continuității (1.23) cazul electronilor, iar mai apoi a fost aplicată schema lui Scharfetter Gummel. Concentrațiile de electroni ( $n$ ) și de goluri ( $p$ ) au fost discretizate în nodurile întregi  $(x_1^{(i)}, x_2^{(j)})$  cu  $x_1^{(i)} = (i - 1)h_{x_1}$ ,  $x_2^{(j)} = (j - 1)h_{x_2}$ , iar densitățile curenților de electroni ( $J_n$ ) în seminodurile  $(x_1^{(i-1/2)}, x_2^{(j)})$ ,  $(x_1^{(i+1/2)}, x_2^{(j)})$ ,  $(x_1^{(i)}, x_2^{(j-1/2)})$ ,  $(x_1^{(i)}, x_2^{(j+1/2)})$  cu  $x_1^{(i-1/2)} = (i - 1/2)h_{x_1}$ ,  $x_2^{(i+1/2)} = (i + 1/2)h_{x_1}$ ,  $x_2^{(j-1/2)} = (j - 1/2)h_{x_2}$ ,  $x_2^{(j+1/2)} = (j + 1/2)h_{x_2}$ .

Astfel s-a trecut la următorul sistem algebric neliniar

$$-\left( \frac{J_{n,i+1/2,j} - J_{n,i-1/2,j}}{h_{x_1}^2} + \frac{J_{n,i,j+1/2} - J_{n,i,j}}{h_{x_2}^2} \right) = -q \left( \frac{n_{ij} p_{ij} - n_i^2}{\tau_p (n_{ij} + n_i) + \tau_n (p_{ij} + n_i)} + (n_{ij} * p_{i,j} - n_i^2) (C_n * n_{i,j} + C_p * p_{i,j}) \right) \quad i = \overline{2, NN}, j = \overline{2, MM} \quad (3.2)$$

Aplicarea schemei lui Scharfetter-Gummel [19], în cazul ecuației (3.2), a însemnat parcurgerea pașilor descriși în continuare.

Folosind ecuația densității pentru electroni

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

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

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

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

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

$$J_{n,i-1/2,j} = V_{i-1/2,j} n_{i-1/2,j} - D_{i-1/2,j} \frac{\partial n_{i-1/2,j}}{\partial \varphi} \quad (3.3)$$

Relația (3.3) înmulțită la  $e^{-\frac{v(\varphi-\varphi_{ij})}{D}}$  a fost rescrisă astfel

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

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

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

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

După realizarea unui șir de transformări s-a obținut

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

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

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

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

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

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

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

Utilizând funcția lui Bernoulli  $B(x) = \frac{x}{e^x - 1}$  în expresia de mai sus, relația de estimare a densității electronilor ( $J_n$ ) în seminodul  $(x_1^{(i-1/2)}, x_2^{(j)})$ , prin nodurile întregi ale rețelei, a luat forma

$$J_{n,i-1/2,j} = q \cdot \frac{\mu_n V_T}{h_{x_1}} \cdot B\left(\frac{\varphi_{i-1,j}-\varphi_{ij}}{\varphi_T}\right) \cdot n_{i-1,j} - q \cdot \frac{\mu_n V_T}{h_{x_1}} \cdot B\left(\frac{\varphi_{ij}-\varphi_{i-1,j}}{\varphi_T}\right) \cdot n_{i,j} \quad (3.4)$$



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

$$J_{n,i+1/2,j} = q \cdot \frac{\mu_n V_T}{h_{x_1}} \cdot B\left(\frac{\varphi_{i,j} - \varphi_{i+1,j}}{\varphi_T}\right) \cdot n_{ij} - q \cdot \frac{\mu_n V_T}{h_{x_1}} \cdot B\left(\frac{\varphi_{i+1,j} - \varphi_{i,j}}{\varphi_T}\right) \cdot n_{i+1,j} \quad (3.5)$$

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

$$J_{n,i,j-1/2} = q \cdot \frac{\mu_n V_T}{h_{x_2}} \cdot B\left(\frac{\varphi_{i,j-1} - \varphi_{i,j}}{\varphi_T}\right) \cdot n_{i,j-1} - q \cdot \frac{\mu_n V_T}{h_{x_2}} \cdot B\left(\frac{\varphi_{i,j} - \varphi_{i,j-1}}{\varphi_T}\right) \cdot n_{ij} \quad (3.6)$$

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

$$J_{n,i,j+1/2} = q \cdot \frac{\mu_n V_T}{h_{x_2}} \cdot B\left(\frac{\varphi_{i,j} - \varphi_{i,j+1}}{\varphi_T}\right) \cdot n_{ij} - q \cdot \frac{\mu_n V_T}{h_{x_2}} \cdot B\left(\frac{\varphi_{i,j+1} - \varphi_{i,j}}{\varphi_T}\right) \cdot n_{i,j+1} \quad (3.7)$$

Relațiile (3.4)-(3.7) au fost substituite în (3.2), realizând trecerea la următorul sistem algebric nelinier de ordinul  $(NN - 1) \times (MM - 1)$

$$\begin{aligned} & \left( \frac{\mu_n V_T B\left(\frac{\varphi_{ij} - \varphi_{i+1,j}}{\varphi_T}\right) + \mu_n V_T B\left(\frac{\varphi_{ij} - \varphi_{i-1,j}}{\varphi_T}\right)}{h_{x_1}^2} + \frac{\mu_n V_T B\left(\frac{\varphi_{ij} - \varphi_{i,j+1}}{\varphi_T}\right) + \mu_n V_T B\left(\frac{\varphi_{ij} - \varphi_{i,j-1}}{\varphi_T}\right)}{h_{x_2}^2} \right) * n_{ij} - \\ & \frac{\mu_n V_T B\left(\frac{\varphi_{i+1,j} - \varphi_{ij}}{\varphi_T}\right)}{h_{x_1}^2} * n_{i+1,j} - \frac{\mu_n V_T B\left(\frac{\varphi_{i-1,j} - \varphi_{ij}}{\varphi_T}\right)}{h_{x_1}^2} * n_{i-1,j} - \frac{\mu_n V_T B\left(\frac{\varphi_{i,j+1} - \varphi_{ij}}{\varphi_T}\right)}{h_{x_2}^2} * n_{i,j+1} - \\ & \frac{\mu_n V_T B\left(\frac{\varphi_{i,j-1} - \varphi_{ij}}{\varphi_T}\right)}{h_{x_2}^2} * n_{i,j-1} = - \left( \frac{n_{ij} p_{ij} - n_i^2}{\tau_p (n_{ij} + n_i) + \tau_n (p_{ij} + n_i)} + (n_{ij} * p_{ij} - n_i^2) * (C_n n_{ij} + C_p p_{ij}) \right) \\ & i = \overline{2, NN}, j = \overline{2, MM} \end{aligned} \quad (3.8)$$

Pentru discretizarea ecuației în derivate parțiale și nelinieră (1.19) ca prim pas au fost folosite diferențele finite pentru ecuația continuității (1.24) cazul golurilor, iar mai apoi a fost aplicată schema lui Scharfetter Gummel.

Concentrațiile de electroni ( $n$ ) și goluri ( $p$ ) au fost discretizate în nodurile întregi  $(x_1^{(i)}, x_2^{(j)})$ , cu  $x_1^{(i)} = (i - 1)h_{x_1}$ ,  $x_2^{(j)} = (j - 1)h_{x_2}$ , iar densitățile curenților pentru goluri ( $J_p$ ) în seminodurile  $(x_1^{(i-1/2)}, x_2^{(j)})$ ,  $(x_1^{(i+1/2)}, x_2^{(j)})$ ,  $(x_1^{(i)}, x_2^{(j-1/2)})$ ,  $(x_1^{(i)}, x_2^{(j+1/2)})$ , cu  $x_1^{(i-1/2)} = (i - 1/2)h_{x_1}$ ,  $x_2^{(i+1/2)} = (i + 1/2)h_{x_1}$ ,  $x_2^{(j-1/2)} = (j - 1/2)h_{x_2}$ ,  $x_2^{(j+1/2)} = (j + 1/2)h_{x_2}$ .

S-a trecut la următorul sistem algebric

$$\left( \frac{J_{p,i+1/2,j} - J_{p,i-1/2,j}}{h_{x_1}^2} + \frac{J_{p,i,j+1/2} - J_{p,i,j-1/2}}{h_{x_2}^2} \right) = -q \left( \frac{n_{ij} p_{ij} - n_i^2}{\tau_p(n_{ij} + n_i) + \tau_n(p_{ij} + n_i)} + (n_{ij} p_{ij} - n_i^2) (C_n n_{ij} + C_p p_{ij}) \right) \quad i = \overline{2, NN}, j = \overline{2, MM} \quad (3.9)$$

La aplicarea schemei lui Scharfetter-Gummel, pentru a discretiza densitatea curenților de goluri ( $J_p$ ) în seminodul  $(x_1^{(i+1/2)}, x_2^{(j)})$  s-a obținut expresia

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

în seminodul  $(x_1^{(i-1/2)}, x_2^{(j)})$  s-a obținut expresia

$$J_{p,i-1/2,j} = q \cdot \frac{\mu_p V_T}{h_{x_1}} \cdot B \left( \frac{\varphi_{i,j} - \varphi_{i+1,j}}{\varphi_T} \right) \cdot p_{i-1,j} - q \cdot \frac{\mu_p V_T}{h_{x_1}} \cdot B \left( \frac{\varphi_{i+1,j} - \varphi_{i,j}}{\varphi_T} \right) \cdot p_{ij} \quad (3.11)$$

în seminodul  $(x_1^{(i)}, x_2^{(j+1/2)})$  s-a obținut expresia

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

și în seminodul  $(x_1^{(i)}, x_2^{(j-1/2)})$  s-a obținut expresia

$$J_{p,i,j-1/2} = q \cdot \frac{\mu_p V_T}{h_{x_2}} \cdot B \left( \frac{\varphi_{i,j} - \varphi_{i,j-1}}{\varphi_T} \right) \cdot p_{i,j-1} - q \cdot \frac{\mu_p V_T}{h_{x_2}} \cdot B \left( \frac{\varphi_{i,j-1} - \varphi_{i,j}}{\varphi_T} \right) \cdot p_{ij} \quad (3.13)$$

Substituind (3.10)-(3.13) în (3.9) a fost realizată trecerea la următorul sistem algebric de ordinul  $(NN - 1) \times (MM - 1)$

$$\left( \frac{\mu_p \varphi_T B \left( \frac{\varphi_{i+1,j} - \varphi_{i,j}}{\varphi_T} \right) + \mu_p \varphi_T B \left( \frac{\varphi_{i-1,j} - \varphi_{i,j}}{\varphi_T} \right)}{h_{x_1}^2} + \frac{\mu_n \varphi_T B \left( \frac{\varphi_{i,j+1} - \varphi_{i,j}}{\varphi_T} \right) + \mu_n \varphi_T B \left( \frac{\varphi_{i,j-1} - \varphi_{i,j}}{\varphi_T} \right)}{h_{x_2}^2} \right) * p_{i,j} - \frac{\mu_p \varphi_T B \left( \frac{\varphi_{i,j} - \varphi_{i+1,j}}{\varphi_T} \right)}{h_{x_1}^2} * p_{i+1,j} - \frac{\mu_p \varphi_T B \left( \frac{\varphi_{i,j} - \varphi_{i-1,j}}{\varphi_T} \right)}{h_{x_1}^2} * p_{i-1,j} - \frac{\mu_p \varphi_T B \left( \frac{\varphi_{i,j} - \varphi_{i,j+1}}{\varphi_T} \right)}{h_{x_2}^2} * p_{i,j+1} - \frac{\mu_p \varphi_T B \left( \frac{\varphi_{i,j} - \varphi_{i,j-1}}{\varphi_T} \right)}{h_{x_2}^2} * p_{i,j-1} = -q * \left( \frac{n_{ij} p_{ij} - n_i^2}{\tau_p(n_{ij} + n_i) + \tau_n(p_{ij} + n_i)} + (n_{ij} p_{ij} - n_i^2) * (C_n n_{ij} + C_p p_{ij}) \right) \quad i = \overline{2, NN}, j = \overline{2, MM} \quad (3.15)$$

Discretizarea condițiilor la frontieră Dirichlet, în nodurile de pe porțiunea conectată la electrozi ( $\Gamma_D$ ), a fost realizată conform relațiilor (1.39). Astfel, a fost obținuți analogii discreți

$$\varphi_{ij} = V_a + \varphi_T \ln \left( \frac{N_{ij} + \sqrt{N_{ij}^2 + 4n_i^2}}{2n_i} \right), \quad n_{ij} = \frac{N_{ij} + \sqrt{N_{ij}^2 + 4n_i^2}}{2}, \quad p_{ij} = \frac{-N_{ij} + \sqrt{N_{ij}^2 + 4n_i^2}}{2} \quad \text{pe } \Omega_D \quad (3.16)$$

Analogii discreți ai condițiilor Neumann (1.40), care acționează pe porțiunea de frontieră neconectată la electrozi ( $\Gamma_N$ ), în nodurile  $\Omega_N$ , sunt

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

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

$$\begin{cases} p_{ij} = p_{2j}, i = 1, j = \overline{1, MM+1} \\ p_{ij} = p_{NNj}, i = NN+1, j = \overline{1, MM+1} \\ p_{ij} = p_{i2}, j = 1, i = \overline{1, NN+1}, x_1^{(i)} > l_a \end{cases} \quad (3.19)$$

Ca următoare etapă, parcursă la crearea modelelor numerice pentru problema (1.17)-(1.19) cu condițiile la frontieră (1.39), (1.40), după trecerea la analogii lor discreți, a fost aplicarea metodelor iterative pentru rezolvarea sistemelor algebrice neliniare obținute (3.1), (3.8), (3.15).

Schema discretă pentru o ecuație în derivate parțiale este un sistem algebric de ecuații, care poate fi scris sub următoarea formă operatoriale

$$Au = f \quad (3.20)$$

unde operatorul  $A$  este matricea coeficienților sistemului,  $u$  vectorul căutat, iar  $f$  vectorul dat, definită de părțile drepte ale ecuațiilor și de condițiile suplimentare (inițiale și cele de la frontieră).

Forma canonică a schemelor iterative implicite pe două nivele aplicate ecuației operatoriale (3.20) este

$$B_{k+1} \frac{y_{k+1} - y_k}{\tau_{k+1}} + Ay_k = f, \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad y_0 \in H \quad (3.21)$$

unde valorile  $\tau_{k+1}$  se numesc parametri iterativi ai schemei. Dacă  $\tau_{k+1}$  depinde de aproximarea iterativă  $y_{k+1}$  atunci procesul iterativ va fi nestaționar. Pentru procesul iterativ staționar  $B_{k+1}$  și  $\tau_{k+1}$  nu depind de iterația curentă ( $k+1$ ).

În procesul modelării numerice din cadrul acestui capitol au fost utilizate și schemele pe trei nivele, care descriu procesele iterative de ordinul doi. Ele au forma

$$B_{k+1}y_{k+1} = \alpha_{k+1}(B_{k+1} - \tau_{k+1}A)y_k + (1 - \alpha_{k+1})B_{k+1}y_{k-1} + \alpha_{k+1}\tau_{k+1}f, \quad k = 1, 2, \dots \quad (3.22)$$

aici  $\{\tau_k\}$  și  $\{\alpha_k\}$  sunt șirurile de parametri iterativi ai schemei.

Pentru aplicarea unei metode iterative cu utilizarea schemei (3.22) pe lângă aproximarea inițială  $y_0$  a mai fost necesară și aproximarea  $y_1$ , care a fost calculată în baza unei metode iterative pe două nivele (3.21) conform schemei

$$B_1 y_1 = (B_1 - \tau_1 A) y_0 + \tau_1 f, \quad y_0 \in H \quad (3.23)$$

Dacă în (3.22)  $B_{k+1} \equiv E$  pentru toți  $k = 0, 1, 2, \dots$  atunci avem schema explicită pe trei nivele și poate fi scrisă sub forma

$$y_{k+1} = \alpha_{k+1} (E - \tau_{k+1} A) y_k + (1 - \alpha_{k+1}) y_{k-1} + \alpha_{k+1} \tau_{k+1} f \quad (3.24)$$

În cazul metodelor iterative staționare parametrii  $\tau_k$  pentru schema pe două nivele (3.21) și  $\tau_k, \alpha_k$  pentru schema pe trei nivele (3.22), (3.23) sunt aleși astfel încât să asigure viteza cea mai mare de convergență către soluția exactă a sistemului pentru orice aproximare inițială.

### 3.2 Modelarea numerică a proceselor neliniare în dispozitivul semiconductor cu aplicarea schemelor pe două nivele

Schemele în diferențe pentru ecuațiile eliptice reprezintă niște sisteme algebrice cu operatori speciali (matrici rare, diagonal predominante), cazul problemei dispozitivului semiconductor, care pot fi tratate ca ecuații operatoriale de gradul întâi.

În acest subcapitol sunt descriși algoritmi de modelare numerică a proceselor neliniare în dioda semiconductoare cu aplicarea metodelor iterative ce folosesc schemele pe două nivele. Convergența schemei în diferențe pe două nivele, aplicată în cazul operatorului neconjugat  $A$  a fost demonstrată în spațiul energetic  $H_D$ , generat de un operator  $D$  autoconjugat și pozitiv definit în spațiul  $H$  [5].

Pentru studierea convergenței metodei iterative trebuie studiată comportarea normei reziduuului  $z_k = y_k - u$ , pentru  $k \rightarrow \infty$ , în spațiul  $H_D$ , unde  $y_k$  este o aproximare iterativă a soluției obținută conform schemei (3.21), iar  $u$  soluția exactă a ecuației operatoriale (3.20). Metoda iterativă converge în  $H_D$  atunci când norma lui  $z_k$  tinde la zero cu  $k \rightarrow \infty$ .

Conform teoriei schemelor în diferențe viteza de convergență depinde de alegerea parametrilor  $\tau_k$ . A fost căutată varianta optimală a șirului de parametri, care ar fi asigurat viteza maximal posibilă. Substituind  $y_k = z_k + u$ , pentru  $k = 0, 1, 2, \dots$  în (3.21) s-a realizat trecerea la următorul sistem algebric omogen

$$B \frac{z_{k+1} - z_k}{\tau_{k+1}} + A z_k = 0, \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad z_0 = y_0 - u$$

Rezolvând ecuația omogenă, în raport cu necunoscuta  $z_{k+1}$ , a fost obținută soluția

$$z_{k+1} = (E - \tau_{k+1} B^{-1} A) z_k$$

Substituind  $z_k = x_k$  s-a trecut la ecuația pentru reziduuul echivalent  $x_k$  ce conține un singur operator și are forma

$$x_{k+1} = S_{k+1} x_k, \quad \text{cu} \quad S_{k+1} = E - \tau_{k+1} C, \quad k = 0, 1, \dots \quad C = D^{1/2} B^{-1} A D^{-1/2} \quad (3.25)$$

Este adevărată următoarea estimare  $\|x_k\| = \|D^{1/2} z_k\| = \|z_k\|_D$ .

Studierea convergenței metodei iterative cu aplicarea schemei (3.21) în  $H_D$  s-a redus la studierea șirului numeric  $\|x_k\|$ ,  $k = 1, 2, \dots$ , unde  $x_k$  este determinat conform relației (3.25).

Rezolvând (3.25) s-a obținut

$$x_k = T_{k,0}x_0, \quad T_{k,0} = \prod_{i=1}^k S_i = S_n S_{n-1} \dots S_1$$

Din relația de mai sus a fost obținută următoarea estimare pentru norma rezidului  $z_k$  în  $H_D$

$$\|z_k\|_D = \|x_k\| \leq \|T_{k,0}\| \|x_0\| = \|T_{k,0}\| \|z_k\|_D \quad (3.26)$$

Operatorul  $T_{k,0}$  se numește operatorul rezolvabil la iterația  $k$  (operatorul trecerii de la iterația (0) la iterația ( $k$ )), iar  $S_k$  este operatorul trecerii de la iterația ( $k - 1$ ) la iterația ( $k$ ).

Din (3.26) rezultă că metoda iterativă cu aplicarea schemei (3.21) converge în  $H_D$  dacă norma operatorului  $T_{k,0}$  tinde la zero când  $k \rightarrow \infty$ . Astfel, studierea convergenței metodei iterative (3.21) în  $H_D$  s-a redus la studierea dependenței normei operatorului  $T_{k,0}$  în spațiul  $H$  de iterația ( $k$ ).

Operatorul  $T_{k,0}$  este definit de operatorul  $C$  și parametrii iterativi  $\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_k$ . Operatorul  $C$  a fost considerat fix și atunci s-a pus problema de a alege parametrii  $\{\tau_k\}$  astfel încât metoda iterativă să convergă.

Printre metodele iterative convergente cea mai eficientă se consideră cea pentru care parametrii  $\tau_k$  asigură calcularea soluției cu o exactității prestabilită într-un număr minim de iterații.

Această condiție, folosind estimarea (3.26), a fost reformulată astfel: pentru numărul de iterații dat ( $k_0$ ) de construit șirul de parametri  $\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_{k_0}$  pentru care norma operatorului  $T_{k_0,0}$  să fie minimală.

La prima etapă, din cadrul algoritmului modelării numerice a funcționalității diodei semiconductoare cu aplicarea unei scheme pe două nivele, a fost realizată discretizarea ecuațiilor în derivate parțiale (1.17)-(1.19) și trecerea la sistemul algebric neliniar (3.1), (3.8), (3.15). Au fost calculate valorile inițiale ale funcțiilor necunoscute conform relațiilor (3.16) cu  $V_a = 0$ , pe întreg domeniul de definiție  $\bar{\Omega}$  și notate prin  $\varphi^{(0)}$ ,  $n^{(0)}$ ,  $p^{(0)}$ .

La etapa următoare a fost organizat un ciclu extern în cadrul căruia, la fiecare iterație, cu pași mici, tensiunea aplicată la anod a fost mărită, iar valorile funcțiilor necunoscute au fost recalculat în condițiile echilibrului termodinamic și notate prin  $\varphi^{(m+1)}$ ,  $n^{(m+1)}$ ,  $p^{(m+1)}$  unde ( $m + 1$ ) este iterația curentă a ciclului extern.

În cadrul ciclului extern a fost organizat ciclul de rezolvare a sistemului algebric neliniar (3.1), (3.8), (3.15) de ordinul  $(3 * NN) \times (3 * MM)$  cu condițiile la frontieră (3.16)-(3.19). Valorile inițiale ale funcțiilor necunoscute, în cadrul acestui ciclu au fost egale cu valorile curente ale ciclului extern  $\varphi^{(n+1)} = \varphi^{(m+1)}$ ,  $n^{(n+1)} = n^{(m+1)}$ ,  $p^{(n+1)} = p^{(m+1)}$ , unde  $(n + 1)$ , iterația curentă a ciclului cu  $n = 0$ .

În cadrul ciclului ce rezolvă sistemul algebric neliniar de ordinul  $(3 * NN) \times (3 * MM)$  au fost organizate trei cicluri interne consecutive, pentru rezolvarea a câte un sistem algebric liniar de ordinul  $(NN - 1) \times (MM - 1)$ . Valorile inițiale ale funcțiilor necunoscute, pentru fiecare ciclu intern, au fost egale cu valorile curente ale ciclului ce le conține  $\varphi^{(k+1)} = \varphi^{(n+1)}$ ,  $n^{(k+1)} = n^{(n+1)}$ ,  $p^{(k+1)} = p^{(n+1)}$ , unde  $(k + 1)$  este iterația curentă a ciclului intern cu  $k = 0$ , iar  $(n + 1)$  iterația curentă al ciclului superior ce rezolvă sistemul de ordinul  $(3 * NN) \times (3 * MM)$ .

Sistemului algebric neliniar (3.1) i-a fost aplicată schema pe două nivele (3.22), iar mai apoi ideea algoritmului lui Gummel pentru liniarizarea lui și separarea de sistemele (3.8) și (3.15). Ca necunoscută a rămas doar potențialul electrostatic ( $\varphi$ ), iar concentrațiile de electroni ( $n$ ) și goluri ( $p$ ) au fost luate ca constante cu valori calculate la iterația precedentă. Astfel a fost obținut un sistem algebric liniar în necunoscuta potențialului electrostatic ( $\varphi$ ) de ordinul  $(NN - 1) \times (MM - 1)$ . Estimarea potențialului electrostatic ( $\varphi$ ) la iterația curentă  $(k + 1)$ , în nodurile interne ale rețelei ( $\Omega_h$ ), a fost realizată conform sistemului

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

$$i = \overline{2, NN}, j = \overline{2, MM} \quad (3.27)$$

Valoarea curentă a potențialului electrostatic ( $\varphi^{(k+1)}$ ) a fost calculată iterativ, în cadrul ciclului intern, până la atingerea exactității prestabilite.

La ieșirea din ciclul intern (3.27) au fost calculate valorile curente ale potențialului electrostatic ( $\varphi^{(k+1)}$ ) în nodurile de pe frontieră conform relațiilor (3.16),(3.17), iar valoarea curentă a potențialului electrostatic din cadrul ciclului superior ( $\varphi^{(n+1)}$ ) a fost egalată cu valoarea curentă a ciclului intern  $\varphi^{(n+1)} = \varphi^{(k+1)}$ .

Sistemului algebric neliniar (3.8) i-a fost aplicată schema pe două nivele (3.22) și ideea algoritmului lui Gummel pentru liniarizarea lui, care duce la separarea lui de sistemele (3.1) și (3.15). Ca necunoscută a rămâne doar concentrația de electroni ( $n$ ), iar potențialul electrostatic ( $\varphi$ ) și concentrația pentru goluri ( $p$ ) au fost luate ca constante, cu valori calculate la iterația precedentă. A fost obținut un sistem algebric liniar în necunoscuta concentrației pentru electroni

( $n$ ) de ordinul  $(NN - 1) \times (MM - 1)$ . Estimarea valorii concentrației pentru electroni ( $n$ ) la iterația curentă ( $k + 1$ ), în nodurile interne ale rețelei ( $\Omega_h$ ), a fost realizată conform sistemului

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

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

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

$$i = \overline{2, NN}, j = \overline{2, MM} \quad (3.28)$$

Valoarea curentă a concentrației pentru electroni ( $n^{(k+1)}$ ) a fost calculată iterativ, în cadrul ciclului intern, până la atingerea exactității prestabilite.

La ieșirea din ciclul intern (3.28) au fost calculate valorile concentrației pentru electroni ( $n^{(k+1)}$ ) în nodurile de pe frontieră conform relațiilor (3.16),(3.18), iar valoarea curentă a concentrației pentru electroni din cadrul ciclului superior ( $n^{(n+1)}$ ) a fost egalată cu valoarea curentă a ciclului intern  $n^{(n+1)} = n^{(k+1)}$ .

Sistemului algebric neliniar (3.15) i-a fost aplicată schema pe două nivele (3.22), iar mai apoi ideea algoritmului lui Gummel pentru liniarizarea lui și separarea de sistemele (3.1) și (3.8). Ca necunoscută a rămas doar concentrația de goluri ( $p$ ), iar potențialul electrostatic ( $\varphi$ ) și concentrația de electroni ( $n$ ) au fost luate ca constante cu valori calculate la iterația precedentă.

A fost obținut un sistem algebric liniar în necunoscuta concentrației pentru goluri ( $p$ ) de ordinul  $(NN - 1) \times (MM - 1)$ . Estimarea valorii concentrației pentru goluri ( $p$ ) la iterația curentă ( $k + 1$ ), în nodurile interne ale rețelei ( $\Omega_h$ ), a fost realizată conform sistemului

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

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

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

$$i = \overline{2, NN}, j = \overline{2, MM} \quad (3.29)$$

Noua valoare a concentrației pentru goluri ( $p^{(k+1)}$ ) a fost calculată iterativ în cadrul ciclului intern, până la atingerea unei exactități prestabilite.

La ieșirea din ciclul intern (3.29) au fost calculate valorile curente ale concentrației de goluri  $p^{(k+1)}$  în nodurile de pe frontieră, conform relațiilor (3.16),(3.19). Valoarea concentrației pentru goluri  $p^{(n+1)}$  din ciclul comun celor trei funcții necunoscute a fost egalată cu valoarea concentrației pentru goluri obținută în cadrul ciclului intern  $p^{(n+1)} = p^{(k+1)}$ .

Ciclul de rezolvare al sistemului algebric neliniar (3.1), (3.8), (3.15) de ordinul  $((3 * NN) \times (3 * MM))$  a rulat atât timp până când a fost atinsă exactitatea prestabilită la calcularea soluției sistemului algebric  $\{\varphi^{(n+1)}, n^{(n+1)}, p^{(n+1)}\}$ .

La ieșirea din acest ciclu s-a trecut la următoarea iterație a ciclului extern în cadrul căreia valorile externe ale funcțiilor necunoscute au fost modificate  $\varphi^{(m+1)} = \varphi^{(n+1)}$ ,  $n^{(m+1)} = n^{(n+1)}$ ,  $p^{(m+1)} = p^{(n+1)}$ , cu  $(m + 1)$  iterația curentă a ciclului extern. În cadrul aceleiași iterații externe a fost mărită tensiunea aplicată la anod  $V_a$  și recalulate valorile variabilelor  $\{\varphi^{(m)}, \varphi_n^{(m)}, \varphi_p^{(m)}\}$  în condițiile echilibrului termodinamic. Procesul iterativ extern a durat până când  $V_a$  a depășit valoarea 0,2 A.

În cadrul ciclurilor interne de rezolvare a sistemelor algebrice liniare (3.27) în necunoscuta potențialului electrostatic ( $\varphi$ ), (3.28) în necunoscuta concentrației de electroni ( $n$ ) și (3.29) în necunoscuta concentrației de goluri ( $p$ ) au fost aplicate mai multe metode iterative.

### 3.2.1 Algoritmul numeric cu aplicarea Metodei Iterațiilor Simple (MIS)

Dacă în schema iterativă pe două nivele (3.22)  $\tau_{k+1} = \tau_k$ , adică este o constantă ce nu depinde de iterația metodei, atunci ea se numește Schema Metodei Iterațiilor Simple și poate fi scrisă sub o formă mai simplă

$$\frac{y^{(k+1)} - y^{(k)}}{\tau} + Ay^{(k)} = b \quad (3.30)$$

unde  $y^{(k)}$  este soluția calculată la iterația precedentă,  $y^{(k+1)}$  soluția calculată la iterația curentă,  $\tau \neq 0$  parametrul metodei.

Expresia explicită pentru estimarea valorii funcției necunoscute la iterația curentă este

$$y^{(k+1)} = -\tau (Ay^{(k)} - b) + y^{(k)} = -\tau r^{(k)} + y^{(k)}, \quad (3.31)$$



unde  $r^{(k)}$  este reziduul metodei ( $r^{(k)} = Ay^{(k)} - b$ ), la iterația ( $k$ ).

A fost stabilită complexitatea MIS, teoretic. Analizând schema MIS (3.31) s-a constatat că pentru realizarea ei au fost efectuate o operație de înmulțire a matricei la un vector și trei operații aritmetice asupra vectorilor (două scăderi și o înmulțire la scalar). Dacă notăm prin  $nn \times nn$  ordinul matricei  $A$  și luând în calcul că este o matrice predominant cinci diagonală, numărul total de operații, la o iterație, a fost calculat în baza următoarelor componente  $t_0 = 5nn$  ca număr de operații scalare necesare pentru calcularea valorilor inițiale,  $t_1 = 6nn$  numărul de adunări/scăderi ale scalarilor la realizarea unei iterații interne,  $t_2 = 6nn$  numărul de înmulțiri/împărțiri ale scalarilor la realizarea unei iterații interne.

Numărul minim de iterații necesar  $k_0$ , estimat teoretic în cazul MIS, pentru determinarea soluției cu exactitatea prestabilită este

$$k_0(\text{eroarea}) = \ln(\text{eroare})/\ln(\rho) \approx 0,2 NM^2 \ln \frac{1}{\text{eroare}} \quad (3.32)$$

unde  $NM$ , numărul de noduri ale rețelei pe o direcție,  $\rho$  este viteza de convergență a metodei. Astfel, numărul minim de iterații estimat în cazul aplicării MIS este proporțional cu pătratul numărului de noduri pe o direcție, de unde rezultă că este proporțională cu numărul de necunoscute ale sistemului algebric.

Numărul total de operații necesar pentru calcularea soluției sistemului (3.1), (3.8), (3.15) este  $T = 36 * nn * k_0 + 5 * nn$  operații.

Conform teoriei, viteza de convergență a metodei iterative  $\rho$ , în cazul MIS

$$\rho = \frac{1-\xi}{1+\xi}, \text{ cu } \xi = \frac{\gamma_1}{\gamma_2}, \gamma_1 = \sum_{i=1}^2 \frac{4}{h_i^2} \cos^2 \frac{\pi h_i}{2l_i}, \gamma_2 = \sum_{i=1}^2 \frac{4}{h_i^2} \sin^2 \frac{\pi h_i}{2l_i} \quad (3.33)$$

unde  $h_i$  este pasul rețele,  $\gamma_1$  și  $\gamma_2$  sunt valorile proprii ale lui  $A$ , maximală și minimală, respectiv.

Ordinul de convergență al *MIS* estimat teoretic este

$$\mathcal{O}(h_i^2) \quad (3.34)$$

Rezultate numerice, obținute în urma experimentelor asupra algoritmului modelării numerice a diodei semiconductoare cu utilizarea MIS:

a) Tabelul numărului mediu de iterații, efectuate pentru calculării soluțiilor cu exactitatea prestabilită de ordinul  $10^{-10}$ , obținut în urma măsurărilor experimentale asupra algoritmului numeric ce modelează matematic procesele neliniare în dioda semiconductoare (cazul MIS), implementat pe o rețea de noduri ( $16 \times 32$ ):

**Tabel 3.1: Numărul mediu de iterații. Cazul tripletului de necunoscute {  $\varphi$ ,  $n$  și  $p$  } cu aplicarea MIS**

nr. de iterații interne, pentru $\varphi$	nr. de iterații interne, pentru $n$	nr. de iterații interne, pentru $p$	nr. total de iterații	iterații externe	durata, (minute)
351797	230245	273378	855420	516	480

b) Suprafețele funcțiilor  $\varphi$ ,  $n$  și  $p$ , construite în baza rezultatelor experimentale, obținute la rezolvarea problemei diodei semiconductoare cu utilizarea MIS, sunt reprezentate în *Anexa 2*.

Remarca 3.1 *Metoda iterațiilor simple, care este un caz particular al Metodei lui Jacobi, cazul parametrului optimal, este o metodă lentă. Plusul metode este convergența pentru orice aproximație inițial a soluție.*

### 3.2.2 Algoritmul numeric cu aplicarea Metodei Gauss-Seidel (MGS)

MGS este o metodă de rezolvare a sistemelor  $Au = f$  tip Cramer, prin aproximări succesive. Matricea  $A$  este descompusă în suma  $L + D + U$ , unde  $L$  este matrice triunghiulară sub diagonală,  $D$  matrice diagonală și  $U$  matrice triunghiulară supra diagonală. Schema iterativă pe două nivele a metodei are forma

$$(L + D)y + Uy^{(k)} = b \quad (3.35)$$

$$y^{(k+1)} = (L + D)^{-1} \cdot (b - Uy^{(k)}) \quad (3.36)$$

Pentru MGS șirul de soluții, generat de orice aproximație inițială  $y^{(0)}$ , converge la soluția exactă în unul din următoarele cazuri:

- 1) Matricea sistemului  $A$  este diagonal dominantă.
- 2) Matrice  $A$  este simetrică, are elementele de pe diagonala principală pozitive și este pozitiv definită.

Ca condiție de stopare a procesului iterativ a fost utilizată relația

$$\|y^{(k+1)} - y^{(k)}\| \leq \varepsilon$$

iar pentru un calcul mai exact al soluției, dar care necesită mai multe iterații, poate fi aplicată relația

$$\|Ay^{(k+1)} - f\| \leq \varepsilon$$

A fost stabilită complexitatea MGS, teoretic. Analizând schema pe două nivele (3.36) s-a constatat că pentru realizarea ei trebuiesc efectuate o operație de înmulțire a matricei la un vector și trei operații aritmetice asupra vectorilor (de scădere, adunare și împărțirea la un scalar). Dacă notăm prin  $nn \times nn$  ordinul matricei  $A$  și luând în calcul că este o matrice predominant cinci

diagonală numărul total de operații, la o iterație, a fost calculat în baza următoarelor componente  $t_0 = 5nn$  ca număr de operații scalare necesare pentru calcularea valorilor inițiale,  $t_1 = 11nn$  numărul de adunări/scăderi ale scalarilor la realizarea unei iterații interne,  $t_2 = 9nn$  numărul de înmulțiri/împărțiri ale scalarilor la realizarea unei iterații interne.

Numărul minim de iterații necesar  $k_0$ , estimat teoretic în cazul MGS, pentru calcularea soluției cu exactitatea prestabilită este

$$k_0(\text{eroarea}) = \frac{\ln(\text{eroare})}{\ln(\rho)} \approx 0,1NM^2 \ln \frac{1}{\text{eroare}} \quad (3.37)$$

unde  $NM$  este numărul de noduri ale rețelei pe o direcție. Astfel, numărul minim de iterații, estimat în cazul aplicării MGS, este proporțional cu pătratul numărului de noduri pe o direcție, de unde rezultă că este proporțională cu numărul de necunoscute ale sistemului algebric  $mn$ .

Numărul total de operații, necesar pentru calcularea soluției sistemului (3.1), (3.8), (3.15), este  $T = 60 * nn * k_0 + 5 * nn$  operații.

Conform teoriei, viteza de convergență a metodei iterative este notată cu  $\rho$ . În cazul MGS

$$\rho = \left( \frac{1-\sqrt{\xi}}{1+\sqrt{\xi}} \right)^{1/2}, \quad \xi = \frac{\gamma_1}{\gamma_2}, \quad \gamma_1 = \frac{8}{h_i^2} \sin^2 \frac{\pi h_i}{2}, \quad \gamma_2 = \frac{8}{h_i^2} \cos^2 \frac{\pi h_i}{2} \quad (3.38)$$

unde  $h_i$  este pasul rețele,  $\gamma_1$  și  $\gamma_2$  sunt valorile proprii ale lui  $A$  maximală și minimală, respectiv.

Ordinul de convergență al MGS, estimat teoretic este

$$\mathcal{O}(h_i^2) \quad (3.39)$$

Rezultate numerice, obținute în urma experimentelor asupra algoritmului modelării numerice a diodei semiconductoare cu utilizarea MGS:

a) Tabelul numărului mediu de iterații, efectuate pentru calculării soluțiilor cu exactitatea prestabilită de ordinul  $10^{-10}$ , obținut în urma măsurărilor experimentale asupra algoritmului numeric ce modelează matematic procesele neliniare în dioda semiconductoare (cazul MGS), implementat pe o rețea de noduri ( $16 \times 32$ ):

**Tabel 3.2: Numărul mediu de iterații. Cazul tripletului de necunoscute {  $\varphi$ ,  $n$  și  $p$  } cu aplicarea MGS**

nr. de iterații interne, pentru $\varphi$	nr. de iterații interne, pentru $n$	nr. de iterații interne, pentru $p$	nr. total de iterații	nr. total de iterații externe	Durata (minute)
43965	18472	19489	81926	64	30

b) Suprafețele funcțiilor  $\varphi$ ,  $n$  și  $p$ , construite în baza rezultatelor obținute experimental, la rezolvarea problemei diodei semiconductoare cu utilizarea MGS, sunt prezentate în Anexa 2.

Remarca 3.2 *Metoda Gauss-Seidel are o convergență lentă către soluția exactă, pentru orice aproximare inițială a ei, dar în cazul acestei metode se câștigă la viteza convergenței datorită numărului de calcule mai mic la fiecare iterație.*

Remarca 3.3 *Metoda Gauss-Seidel ce implică modificarea unei necunoscute la fiecare moment de timp, este preferabilă metodei iterațiilor simple MIS, care impune modificarea tuturor necunoscutelor în același timp.*

Remarca 3.4 *Pentru sisteme mari de ecuații, algoritmul Gauss-Seidel converge lent, deoarece raza spectrală a matricei  $\rho(-(L + D)^{-1}U)$  este în vecinătatea lui 1.*

Remarca 3.5 *Eficiența metodei lui Gauss-Seidel crește dacă are matricea sistemului  $A$  diagonal dominantă, cel puțin ar converge tot atât de repede ca și metoda Jacobi.*

Remarca 3.6 *Pentru aplicare metodei lui Gauss-Seidel se recomandă ca în cazul când matricea  $A$  este dominantă pe linii să se ia startul cu ecuația  $i$  în care se realizează dominanța maximă a elementului diagonal, astfel se realizează reducerea maximă a erorii la start. În continuare, pot fi ordonate celelalte ecuații după gradul de dominanță a elementelor diagonale.*

### 3.2.3 Algoritmul numeric cu aplicarea Metodei de Relaxare Superioară (MRS)

Schema iterativă a metodei relaxării poate fi scrisă sub forma

$$Ly^{(k+1)} + \frac{1}{\omega} D(y^{(k+1)} + (1 - \omega)y^{(k)}) + Uy^{(k)} = f \quad (3.40)$$

$$y^{(k+1)} = L^{-1} \cdot \left( f - \frac{1}{\omega} D(y^{(k+1)} + (1 - \omega)y^{(k)}) - Uy^{(k)} \right) \quad (3.41)$$

Pentru cazul  $\omega > 1$  metoda se numește metoda relaxării superioare, pentru  $\omega < 1$  metoda relaxării inferioare, iar pentru  $\omega = 1$ , metoda lui Gauss-Seidel.

Metoda relaxării superioare este ca o generalizare a metodei lui Gauss-Seidel și are ca scop accelerarea convergenței metodelor iterative, care în cazul metodei lui Gauss-Seidel devine tot mai lentă odată cu creșterea ordinului matricei sistemului.

Remarcă 3.7 *Condiția  $\omega \in (0,2)$  este o condiția necesară pentru convergența Metodei Relaxării Superioare pentru orice valoare inițială a soluției  $y^{(0)}$  și pentru matricea  $A$  oarecare.*

A fost stabilită complexitatea metodei relaxării superioare, teoretic. Analizând schema (3.41) s-a constatat că pentru realizarea sunt efectuate două operații de înmulțire a matricei la un vector și patru operații aritmetice asupra vectorilor (de adunare, scădere, înmulțire la o constantă, împărțire la o constantă). Dacă notăm prin  $nn \times nn$  ordinul matricei  $A$  și luând în calcul că este o

matrice predominant cinci diagonală, numărul total de operații la o iterație a fost calculat în baza următoarelor componente  $t_0 = 5nn$ , ca număr de operații scalare necesare pentru calcularea valorilor inițiale,  $t_1 = 6nn$ , numărul de adunări/scăderi ale scalarilor necesare la realizarea unei iterații interne,  $t_2 = 6nn$ , numărul de înmulțiri/împărțiri ale scalarilor efectuate la realizarea unei iterații interne.

Numărul minim de iterații necesar  $k_0$ , estimat teoretic în cazul MRS, pentru determinarea soluției cu exactitatea prestabilită este

$$k_0(\text{eroarea}) = \ln\left(\frac{1}{\text{eroarea}}\right) * \frac{2NM}{\pi} \approx 0,64 * NM * \ln\frac{1}{\text{eroarea}} \quad (3.42)$$

unde  $NM$  numărul de noduri ale rețelei pe o direcție. Astfel, numărul minim de iterații este proporțional cu numărul de noduri pe o direcție, de unde rezultă că este proporțional cu rădăcina din numărul de necunoscute ale sistemului algebric  $\sqrt{nn}$ .

Numărul total de operații, necesar pentru calcularea soluției sistemului (3.1), (3.8), (3.15), este  $T = 45 * nn * k_0 + 5 * nn$  operații.

Conform teoriei, viteza de convergență a metodei iterative  $\rho$  în cazul MRS este

$$\rho = \left(\frac{1-\sqrt{\xi}}{1+\sqrt{\xi}}\right)^{1/2}, \quad \xi = \frac{\gamma_1}{\gamma_2}, \quad \gamma_1 = 2\sin^2\frac{\pi}{2NM}, \quad \gamma_2 = \frac{8}{h_i^2}\cos^2\frac{\pi h_i}{2} \quad (3.42)$$

unde  $h_i$  este pasul rețele,  $\gamma_1$  și  $\gamma_2$  sunt valorile proprii ale lui  $A$ , maximală și minimală, respectiv.

Ordinul de convergență al MRS, estimat teoretic, este

$$\mathcal{O}(h_i^1) \quad (3.43)$$

Rezultate numerice, obținute în urma experimentelor asupra algoritmului modelării numerice a diodei semiconductoare cu utilizarea Metodei Relaxări Superioare ( $\omega_{opt} = 1,64$ ):

a) Tabelul numărului mediu de iterații, efectuate pentru calculării soluțiilor cu exactitatea prestabilită de ordinul  $10^{-10}$ , obținut în urma măsurărilor experimentale asupra algoritmului numeric ce modelează matematic procesele neliniare în dioda semiconductoare (cazul MRS), implementat pe o rețea de noduri ( $16 \times 32$ ):

**Tabel 3.3: Numărul mediu de iterații. Cazul tripletului de necunoscute {  $\varphi$ ,  $n$  și  $p$  } cu aplicarea MRS**

nr. de iterații interne, $\varphi$	nr. de iterații interne, $n$	nr. de iterații interne, $p$	nr. total de iterații	nr. de iterații externe	Durata (minute)
3138	2213	3409	8860	158	5

b) Suprafețele funcțiilor  $\varphi$ ,  $n$  și  $p$ , construite în baza rezultatelor experimentale, obținute la rezolvarea problemei diodei semiconductoare cu utilizarea MRS, sunt prezentate în Anexa 2.

Remarca 3.8 În cazul Metodei Relaxării Superioare se câștigă la viteza convergenței către soluția exactă, cu orice aproximare inițială, datorită numărului mai mic de calcule la fiecare iterație, în comparație cu metoda Gauss-Seidel, spre exemplu.

Remarca 3.9 Viteza de convergență către soluția exactă este determinată de alegerea valorii parametrului metodei. Se știe că pentru rezolvarea unor clase de sisteme rare metoda relaxației necesită  $\vartheta(nn^2)$  iterații, iar la utilizarea parametrului optimal  $\omega_{opt}$  metoda are ordinul de convergență  $\vartheta(nn)$  iterații,  $nn$  - numărul de necunoscute ale sistemului algebric.

Remarca 3.10 În caz general nu există o formulă pentru calcularea valorii optimale a parametrului metodei  $\omega_{opt}$ , care ar asigura convergența cea mai bună a metodei. La rezolvarea unui sistem de ecuații cu derivate parțiale poate fi folosită formula  $\omega_{opt} \approx 2 - \vartheta(h)$ , unde  $h$  este pasul rețelei. O estimare mai exactă, în unele cazuri, a parametrului metodei poate fi făcută folosind formula  $\omega_{opt} = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \rho^2(D^{-1}(R+L))}}$ , unde  $\rho$  este raza spectrală a matricei.

### 3.3 Algoritmi ai modelării numerice a proceselor neliniare în dispozitivul semiconductor cu aplicarea metodelor iterative combinat

#### 3.3.1 Metoda Gradientilor Conjugați (MGC)

Metoda Gradientilor Conjugați (MGC) poate fi aplicat atât ca metodă directă cât și ca metodă iterativă. Teoretic, cu utilizarea MGC soluția exactă se obține în mai puțin de  $m$  iterații, unde  $m$  este numărul de valori proprii ale sistemului, distincte. MGC este aplicată și în cazul când nu se cunosc limitele diapazonului spectral, iar ordinul matricei  $A$  este cu mult mai mare decât numărul de iterații necesar pentru a obține soluția aproximativă cu o eroare prestabilită.

La aplicarea MGC soluția la iterația curentă ( $k + 1$ ) poate fi estimată conform expresiei

$$y^{(k+1)} = y^{(k)} + \tau_k \omega^k \quad (3.44)$$

unde  $\omega^{(k)}$  este vectorul director, iar parametrul  $\tau_k$  se alege astfel încât vectorul  $\omega^{(k)}$  să fie  $A$  conjugat cu vectorul  $\omega^{(k-1)}$ , adică are loc relația  $(\omega^{(k)}, A\omega^{(k-1)}) = 0$ .

Valoarea lui  $\tau_k$  se calculează din condiția de minimizare a funcționalei pătratice

$$\tau_k = \frac{(\omega^{(k)}, r^{(k)})}{(\omega^{(k)}, A\omega^{(k)})} \quad (3.45)$$

Luând în calitate de valoare inițială a soluției vectorul  $y^{(0)} \in R^m$  ea va genera un șir de aproximări ale soluției sistemului, conform expresiilor

$$y^{(1)} = (E - \tau_1 A)y^{(0)} + \tau_1 f \quad (3.46)$$

$$y^{(k+1)} = \alpha_{k+1}(E - \tau_{k+1}A)y^{(k)} + (1 - \alpha_{k+1})y^{(k-1)} + \alpha_{k+1}\tau_{k+1}f \quad (3.47)$$

$$\tau_{k+1} = \frac{(r^{(k)}, r^{(k)})}{(Ar^{(k)}, r^{(k)})}, \quad r_k = Ay^{(k)} - f, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (3.48)$$

$$\alpha_1 = 1, \quad \alpha_{k+1} = \left(1 - \frac{\tau_{k+1}}{\tau_k} * \frac{(r_k, r_k)}{(Ar_{k-1}, r_{k-1})} * \frac{1}{\alpha_k}\right)^{-1}, \quad k = 1, 2, \dots \quad (3.49)$$

S-a demonstrat că există un număr natural  $k_0 < m$  astfel încât elementul  $y^{(k_0)}$  al șirului (3.49) coincide cu soluția exactă a sistemului  $u$ , unde  $m$  este numărul de valori proprii distincte ale matricei caracteristice.

Elementele șirului  $y^{(1)}, y^{(2)}, y^{(3)} \dots y^{(k)}$  devin din ce în ce mai fine, în sensul apropierii lor de soluția exactă, odată cu creșterea lui  $k$  (numărul de iterații). Pentru eroarea prestabilită  $\varepsilon > 0$  soluția aproximativă poate să se apropie de soluția exactă, adică  $\|y^{(k)} - u\| < \varepsilon$ , chiar și pentru o valoare a lui  $k < m$ , unde  $u$  soluția exactă a sistemului.

În cazul unei slabe condiționări sau a spațiului multidimensional MGC este folosită ca metodă iterativă, iar calculul soluției exacte cu ajutorul relației (3.47) poate duce la calcule instabile.

### 3.3.2 Metoda Gradientilor Bi-Conjugați (MGBiC)

O altă abordare o are metoda gradientilor Bi-Conjugați (MGBiC), la rezolvarea sistemelor nesimetrice și anume, calcularea simultană a două consecutivități de reziduuri  $r^{(k)}$ ,  $\widetilde{r}^{(k)}$  și de redirecționări  $\omega^{(k)}$  și  $\widetilde{\omega}^{(k)}$  pentru matricele  $A$  și  $A^t$ , corespunzător.

$$\begin{aligned} By_{k+1} &= \alpha_{k+1}(B - \tau_{k+1}A)y_k + (1 - \alpha_{k+1})By_{k-1} + \alpha_{k+1}\tau_{k+1}f \\ By_1 &= (B - \tau_1A)y_0 + \tau_1f \quad y_0 \in H \end{aligned} \quad (3.50)$$

Seriile obținute sunt considerate ca bi-ortogonale, adică

$$(\widetilde{r}^{(j)})^t r^{(i)} = (\widetilde{r}^{(i)})^t r^{(j)} = 0, \quad j < i, \quad \text{pentru reziduuri} \quad (3.51)$$

$$(\widetilde{\omega}^{(i)})^t A\omega^{(j)} = (\omega^{(i)})^t A^t \widetilde{\omega}^{(j)} = 0, \quad j < i, \quad \text{pentru redirecționări} \quad (3.52)$$

Șiruri ale reziduurilor și direcțiilor, construite astfel, satisfac următoarea relație

$$(\widetilde{r}^{(i)})^t \omega^{(j)} = (r^{(i)})^t \widetilde{\omega}^{(j)} = 0, \quad j < i \quad (3.53)$$

Algoritmul de utilizare a MGBiC la rezolvarea sistemelor algebrice, cu matricele caracteristice nesimetrice, a presupus parcurgerea următorilor pași

$$\omega^{(0)} = \widetilde{\omega}^{(0)} = r^{(0)} = \widetilde{r}^{(0)} = f - Ay^{(0)} \quad (3.54)$$

Următoarele aproximări au fost obținute conform relațiilor

$$\left\{ \begin{array}{l} \alpha^{(k)} = \frac{(\tilde{r}^{(k)})^t r^{(k)}}{(\tilde{\omega}^{(k)})^t A \omega^{(k)}} \\ y^{(k+1)} = y^{(k)} + \alpha^{(k)} \omega^{(k)} \\ r^{(k+1)} = r^{(k)} - \alpha^{(k)} A \omega^{(k)} \\ \tilde{r}^{(k+1)} = r^{(k)} - \alpha^{(k)} A^t \tilde{\omega}^{(k)} \\ \beta^{(k)} = \frac{(\tilde{r}^{(k+1)})^t r^{(k+1)}}{(\tilde{r}^{(k)})^t r^{(k)}} \\ \omega^{(k+1)} = \omega^{(k)} + \beta^{(k)} \omega^{(k)} \\ \tilde{\omega}^{(k+1)} = \tilde{\omega}^{(k)} + \beta^{(k)} \tilde{\omega}^{(k)} \end{array} \right. \quad (3.55)$$

Sunt cunoscute puține rezultate teoretice despre convergența MGBiC. Pentru sistemele cu matrici caracteristice simetrice și pozitiv definite metoda oferă aceleași rezultate ca și MGC, dar calculele necesare sunt duble la fiecare iterație. În practică, pentru matrici nesimetrice convergența metodei este de la caz la caz.

Câteva exemple de instabilități ale calculelor, cu utilizarea MGBiC și moduri de înlăturare ale lor

- $(\tilde{r}^{(j)})^t r^{(i)} \approx 0$ , acest tip de instabilitate poate fi înlăturată prin niște condiții suplimentare, ceea ce ar duce la încărcarea procesului cu calcule suplimentare,
- $(\tilde{\omega}^{(i)})^t A \omega^{(j)} \approx 0$ , tipul dat de instabilitate apare când descompunerea  $LU$  nu este reușită, în acest caz se face o descompunere mai reușită.

### 3.3.3 Algoritmul numeric cu aplicarea MGC și a MGBiC

La realizarea algoritmului de modelare numerică a dispozitivului semiconductor, descris în acest subcapitol, la etapa realizării ciclurilor interne în cadrul cărora sunt rezolvate sistemele algebrice liniare (3.27) având ca necunoscută potențialul electrostatic ( $\varphi$ ), (3.28) concentrația de electroni ( $n$ ) și (3.29) concentrația de goluri ( $p$ ), fiecare fiind un sistem de ordinul  $(NN - 1)(MM - 1)$ , sunt aplicate metodele semi iterative MGC și MGBiC. Este de menționat faptul că în cazul sistemului (3.27) a fost aplicată MGC (aplicabilă în cazul sistemelor algebrice cu matricea caracteristică simetrică), iar la rezolvarea sistemelor algebrice (3.28), (3.29) MGBiC (cazul sistemelor algebrice cu matricea caracteristică nesimetrică).

Pașii algoritmului cu aplicarea MGC pentru rezolvarea sistemului liniar (3.27), având ca necunoscută potențialul electrostatic ( $\varphi$ ), sunt

Pasul 1 A fost calculat reziduul inițial  $(r^{(k)} = Ay^{(k)} - f^{(k)}, k = 1)$

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



Pasul 2 A fost calculată redirecționarea inițială ( $\omega_k, k = 1$ )

$$\omega_{ij}^{(1)} = r_{ij}^{(1)}, \quad i = \overline{2, NN}, \quad j = \overline{2, MM}$$

Pasul 3 A fost calculată valoarea intermediară ( $t_k$ ):  $t^{(1)} = \sum_{i=0}^{NN+1} \sum_{j=0}^{MM+1} [r_{ij}^{(1)}]^2$ .

Pasul 4 A fost verificată norma vectorului reziduu dacă satisface condiția  $\|r^{(k)}\| < \varepsilon$ . Dacă DA atunci – Stop, în caz contrar s-a trecut la pasul următor.

Pasul 5 Au fost calculate componentele următorului vector intermediar la iterația curentă ( $k + 1$ )

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

și a valorilor intermediare  $\gamma^{(k+1)} = \sum_{i=2}^{NN} \sum_{j=2}^{MM} \omega_{ij}^{(k)} \cdot s_{ij}^{(k+1)} \quad \alpha^{(k+1)} = \frac{t^{(k)}}{\gamma^{(k+1)}}$

Pasul 6 Au fost recalculat componentele potențialului electrostatic ( $\varphi$ ), la iterația curentă ( $k + 1$ ):

$$\varphi_{ij}^{(k+1)} = \varphi_{ij}^{(k)} + \alpha^{(k+1)} \omega_{ij}^{(k)}, \quad i = \overline{1, NN + 1}, \quad j = \overline{1, MM + 1} \quad (3.56)$$

În nodurile de pe frontieră valorile potențialului electrostatic  $\varphi^{(k+1)}$  au fost approximate conform sistemului (3.16),(3.17).

Pasul 7 Au fost recalculat componentele reziduuului la iterația curentă ( $k+1$ )

$$r_{ij}^{(k+1)} = r_{ij}^{(k)} - \alpha^{(k+1)} s_{ij}^{(k+1)} \quad i = \overline{2, NN} \quad j = \overline{2, MM}$$

mai apoi valorile intermediare  $t^{(k+1)} = \sum_{i=2}^{NN} \sum_{j=2}^{MM} [r_{ij}^{(k+1)}]^2, \quad \beta^{(k+1)} = \frac{t^{(k+1)}}{t^{(k)}}$ .

Pasul 8 Au fost recalculat componentele vectorului redirecționării la iterația curentă ( $k+1$ )

$$\omega_{ij}^{(k+1)} = r_{ij}^{(k+1)} + \beta^{(k+1)} \omega_{ij}^{(k)} \quad i = \overline{2, NN}, \quad j = \overline{2, MM}$$

Pasul 9  $k = k + 1$  și s-a revenit la Pasul 4.

Pașii realizați, cu aplicarea MGBiC, la rezolvarea sistemului liniar (3.28) în necunoscuta concentrației de electroni ( $n$ ) și determinarea unei noi valori  $n^{(k+1)}$  cu o exactitate prestabilită

Pasul 1 Au fost estimate valorile inițiale ( $k = 1$ ) ale reziduurilor ( $r_n^{(k)}, \tilde{r}_n^{(k)}$ ) și cele ale redirecționărilor ( $\omega_n^{(k)}, \tilde{\omega}_n^{(k)}$ ) pentru operatorul sistemului și transpusul său, respectiv

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

$$\tilde{r}_{n,ij}^{(1)} = r_{n,ij}^{(1)} = \tilde{\omega}_{n,ij}^{(1)} = \omega_{n,ij}^{(1)} \quad i = \overline{2, NN}, \quad j = \overline{2, MM}$$

$$t_n^{(1)} = \sum_{i=2}^{NN} \sum_{j=2}^{MM} [r_{n,ij}^{(1)}]^2, \quad \tilde{t}_n^{(1)} = \sum_{i=2}^{NN} \sum_{j=2}^{MM} [\tilde{r}_{n,ij}^{(1)}]^2$$

Pasul 2 S-a verificat dacă normele vectorilor reziduu verifică condițiile

$$\|r_{n,ij}^{(k)}\| < \varepsilon \quad \text{și} \quad \|\tilde{r}_n^{(k)}\| < \varepsilon$$

Dacă DA atunci – Stop, în caz contrar s-a trecut la pasul următor.

Pasul 3 Au fost calculate componentele următorilor vectori intermediari

$$\begin{aligned}
S_{n,ij}^{(k)} = & \left( \frac{\mu_n \varphi_{\tau B} \left( \frac{\varphi_{ij}^{(k)} - \varphi_{i+1,j}^{(k)}}{\varphi_{\tau}} \right) + \mu_n \varphi_{\tau B} \left( \frac{\varphi_{ij}^{(k)} - \varphi_{i-1,j}^{(k)}}{\varphi_{\tau}} \right)}{h_{x_1}^2} + \frac{\mu_n \varphi_{\tau B} \left( \frac{\varphi_{ij}^{(k)} - \varphi_{i,j+1}^{(k)}}{\varphi_{\tau}} \right) + \mu_n \varphi_{\tau B} \left( \frac{\varphi_{ij}^{(k)} - \varphi_{i,j-1}^{(k)}}{\varphi_{\tau}} \right)}{h_{x_2}^2} \right) * \omega_{i,j}^{(k)} - \\
& \frac{\mu_n \varphi_{\tau B} \left( \frac{\varphi_{i+1,j}^{(k)} - \varphi_{ij}^{(k)}}{\varphi_{\tau}} \right)}{h_{x_1}^2} * \omega_{i+1,j}^{(k)} - \frac{\mu_n \varphi_{\tau B} \left( \frac{\varphi_{i-1,j}^{(k)} - \varphi_{ij}^{(k)}}{\varphi_{\tau}} \right)}{h_{x_1}^2} * \omega_{i-1,j}^{(k)} - \frac{\mu_n \varphi_{\tau B} \left( \frac{\varphi_{i,j+1}^{(k)} - \varphi_{ij}^{(k)}}{\varphi_{\tau}} \right)}{h_{x_2}^2} * \omega_{i,j+1}^{(k)} - \\
& \frac{\mu_n \varphi_{\tau B} \left( \frac{\varphi_{i,j-1}^{(k)} - \varphi_{ij}^{(k)}}{\varphi_{\tau}} \right)}{h_{x_2}^2} * \omega_{i,j-1}^{(k)},
\end{aligned}$$

$$\tilde{S}_{n,ij}^{(k)} = \left( \frac{\mu_n \varphi_{\tau B} \left( \frac{\varphi_{ij}^{(k)} - \varphi_{i+1,j}^{(k)}}{\varphi_{\tau}} \right) + \mu_n \varphi_{\tau B} \left( \frac{\varphi_{ij}^{(k)} - \varphi_{i-1,j}^{(k)}}{\varphi_{\tau}} \right)}{h_{x_1}^2} + \frac{\mu_n \varphi_{\tau B} \left( \frac{\varphi_{ij}^{(k)} - \varphi_{i,j+1}^{(k)}}{\varphi_{\tau}} \right) + \mu_n \varphi_{\tau B} \left( \frac{\varphi_{ij}^{(k)} - \varphi_{i,j-1}^{(k)}}{\varphi_{\tau}} \right)}{h_{x_2}^2} \right) * \tilde{\omega}_{i,j}^{(k)} -$$

$$\frac{\mu_n \varphi_{\tau B} \left( \frac{\varphi_{i+1,j}^{(k)} - \varphi_{ij}^{(k)}}{\varphi_{\tau}} \right)}{h_{x_1}^2} * \tilde{\omega}_{i+1,j}^{(k)} - \frac{\mu_n \varphi_{\tau B} \left( \frac{\varphi_{i-1,j}^{(k)} - \varphi_{ij}^{(k)}}{\varphi_{\tau}} \right)}{h_{x_1}^2} * \tilde{\omega}_{i-1,j}^{(k)} - \frac{\mu_n \varphi_{\tau B} \left( \frac{\varphi_{i,j+1}^{(k)} - \varphi_{ij}^{(k)}}{\varphi_{\tau}} \right)}{h_{x_2}^2} * \tilde{\omega}_{i,j+1}^{(k)} -$$

$$\frac{\mu_n \varphi_{\tau B} \left( \frac{\varphi_{i,j-1}^{(k)} - \varphi_{ij}^{(k)}}{\varphi_{\tau}} \right)}{h_{x_2}^2} * \tilde{\omega}_{i,j-1}^{(k)}, \quad i = \overline{2, NN}, \quad j = \overline{2, MM}$$

și a următoarelor valori intermediare

$$\gamma_{n,ij}^{(k)} = \sum_{i=2}^{NN} \sum_{j=2}^{MM} \omega_{n,ij}^{(k)} \cdot s_{n,ij}^{(k)} \quad \tilde{\gamma}_{n,ij}^{(k)} = \sum_{i=2}^{NN} \sum_{j=2}^{MM} \tilde{\omega}_{n,ij}^{(k)} \cdot \tilde{s}_{n,ij}^{(k)}$$

$$t^{(k)} = \sum_{i=2}^{NN} \sum_{j=2}^{MM} t_{n,ij}^{(k)} \cdot \tilde{t}_{n,ij}^{(k)} \quad \gamma^{(k)} = \sum_{i=2}^{NN} \sum_{j=2}^{MM} \gamma_{n,ij}^{(k)} \cdot \tilde{\gamma}_{n,ij}^{(k)} \quad \alpha^{(k+1)} = \frac{t^{(k)}}{\gamma^{(k)}}$$

Pasul 4 Au fost calculate componentele concentrației de electroni ( $n$ ) la iterația curentă ( $k + 1$ )

$$n_{ij}^{(k+1)} = n_{ij}^{(k)} + \alpha^{(k+1)} \omega_{ij}^{(k)}, \quad i = \overline{1, NN + 1}, \quad j = \overline{1, MM + 1} \quad (3.57)$$

În nodurile de pe frontieră valorile concentrației de electroni  $n^{(k+1)}$  au fost approximate conform relațiilor din sistemul (3.16),(3.18).

Pasul 5 Au fost recalculat componentele vectorilor reziduu pentru operatorul sistemului și transpusul său, la iterația curentă ( $k + 1$ ), conform relațiilor

$$r_{n,ij}^{(k+1)} = r_{n,ij}^{(k)} - \alpha^{(k+1)} s_{n,ij}^{(k)} \quad \tilde{r}_{n,ij}^{(k+1)} = \tilde{r}_{n,ij}^{(k)} - \alpha^{(k+1)} \tilde{s}_{n,ij}^{(k)} \quad i = \overline{2, NN}, \quad j = \overline{2, MM}$$

și a valorilor intermediare

$$t_n^{(k+1)} = \sum_{i=2}^{NN} \sum_{j=2}^{MM} [r_{ij}^{(k+1)}]^2, \quad \tilde{t}_n^{(k+1)} = \sum_{i=2}^{NN} \sum_{j=2}^{MM} [\tilde{r}_{ij}^{(k+1)}]^2 \quad t^{(k+1)} = \sum_{i=2}^{NN} \sum_{j=2}^{MM} t_{n,ij}^{(k+1)} \cdot \tilde{t}_{n,ij}^{(k+1)}$$

$$\beta^{(k+1)} = \frac{t^{(k+1)}}{t^{(k)}}$$

Pasul 6 Au fost recalculat componentele vectorilor de redirecționare pentru operatorul sistemului și transpusul său, la iterația curentă ( $k + 1$ )

$$\omega_{ij}^{(k+1)} = r_{ij}^{(k+1)} + \beta^{(k+1)} \omega_{ij}^{(k)}, \quad \tilde{\omega}_{ij}^{(k+1)} = \tilde{r}_{ij}^{(k+1)} + \beta^{(k+1)} \tilde{\omega}_{ij}^{(k)} \quad i = \overline{2, NN}, \quad j = \overline{2, MM}$$

Pasul 7 Indicele iterației curente și-a mărit valoarea  $k = k + 1$  și s-a revenit la Pasul 2.

Pașii algoritmului, cu aplicarea MGBiC, realizați pentru rezolvarea sistemului (3.29) în necunoscuta concentrației de goluri ( $p$ ) și determinarea unei noi valori  $p^{(k+1)}$ , cu exactitatea prestabilită, sunt descriși în continuare.

Pasul 1 Au fost estimate valorile inițiale ( $k = 1$ ) ale reziduurilor  $(r_p^{(k)}, \tilde{r}_p^{(k)})$  și redirecționărilor  $(\omega_p^{(k)}, \tilde{\omega}_p^{(k)})$  pentru matricea sistemului și transpusul său, respectiv

$$r_{p,ij}^{(1)} = \left( \frac{\mu_p \varphi_{\tau B} \left( \frac{\varphi_{i+1,j}^{(1)} - \varphi_{ij}^{(1)}}{\varphi_{\tau}} \right) + \mu_p \varphi_{\tau B} \left( \frac{\varphi_{i-1,j}^{(1)} - \varphi_{ij}^{(1)}}{\varphi_{\tau}} \right)}{h_{x_1}^2} + \frac{\mu_n \varphi_{\tau B} \left( \frac{\varphi_{i,j+1}^{(1)} - \varphi_{ij}^{(1)}}{\varphi_{\tau}} \right) + \mu_n \varphi_{\tau B} \left( \frac{\varphi_{i,j-1}^{(1)} - \varphi_{ij}^{(1)}}{\varphi_{\tau}} \right)}{h_{x_2}^2} \right) * p_{i,j}^{(1)} -$$

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

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

$$\tilde{r}_{p,ij}^{(1)} = r_{p,ij}^{(1)} = \tilde{\omega}_{p,ij}^{(1)} = \omega_{p,ij}^{(1)} \quad i = \overline{2, NN}, j = \overline{2, MM}$$

după, au fost calculate următoarele valori inițiale intermediare

$$t_p^{(1)} = \sum_{i=2}^{NN} \sum_{j=2}^{MM} [r_{p,ij}^{(1)}]^2, \quad \tilde{t}_p^{(1)} = \sum_{i=2}^{NN} \sum_{j=2}^{MM} [\tilde{r}_{p,ij}^{(1)}]^2$$

Pasul 2 Au fost verificate normele vectorilor reziduu, pentru matricea sistemului și transpusa sa, dacă satisfac relațiile

$$\|r_{p,ij}^{(k)}\| < \varepsilon \quad \text{și} \quad \|\tilde{r}_p^{(k)}\| < \varepsilon,$$

Dacă DA atunci – Stop, în caz contrar s-a trecut la pasul următor.

Pasul 3 Au fost recalculat componentele următorilor vectori intermediari la iterația curentă ( $k + 1$ )

$$S_{p,ij}^{(k)} = \left( \frac{\mu_p \varphi_{\tau B} \left( \frac{\varphi_{i+1,j}^{(k)} - \varphi_{ij}^{(k)}}{\varphi_{\tau}} \right) + \mu_p \varphi_{\tau B} \left( \frac{\varphi_{i-1,j}^{(k)} - \varphi_{ij}^{(k)}}{\varphi_{\tau}} \right)}{h_{x_1}^2} + \frac{\mu_n \varphi_{\tau B} \left( \frac{\varphi_{i,j+1}^{(k)} - \varphi_{ij}^{(k)}}{\varphi_{\tau}} \right) + \mu_n \varphi_{\tau B} \left( \frac{\varphi_{i,j-1}^{(k)} - \varphi_{ij}^{(k)}}{\varphi_{\tau}} \right)}{h_{x_2}^2} \right) * \omega_{i,j}^{(k)} -$$

$$\frac{\mu_p \varphi_{\tau B} \left( \frac{\varphi_{ij}^{(k)} - \varphi_{i+1,j}^{(k)}}{\varphi_{\tau}} \right)}{h_{x_1}^2} * \omega_{i+1,j}^{(k)} - \frac{\mu_p \varphi_{\tau B} \left( \frac{\varphi_{ij}^{(k)} - \varphi_{i-1,j}^{(k)}}{\varphi_{\tau}} \right)}{h_{x_1}^2} * \omega_{i-1,j}^{(k)} - \frac{\mu_p \varphi_{\tau B} \left( \frac{\varphi_{ij}^{(k)} - \varphi_{i,j+1}^{(k)}}{\varphi_{\tau}} \right)}{h_{x_2}^2} * \omega_{i,j+1}^{(k)} -$$

$$\frac{\mu_p \varphi_{\tau B} \left( \frac{\varphi_{ij}^{(k)} - \varphi_{i,j-1}^{(k)}}{\varphi_{\tau}} \right)}{h_{x_2}^2} * \omega_{i,j-1}^{(k)},$$

$$\begin{aligned} \tilde{S}_{p,ij}^{(k)} = & \left( \frac{\mu_p \varphi_{\tau} B \left( \frac{\varphi_{i+1,j}^{(k)} - \varphi_{ij}^{(k)}}{\varphi_{\tau}} \right) + \mu_p \varphi_{\tau} B \left( \frac{\varphi_{i-1,j}^{(k)} - \varphi_{ij}^{(k)}}{\varphi_{\tau}} \right)}{h_{x_1}^2} + \frac{\mu_n \varphi_{\tau} B \left( \frac{\varphi_{i,j+1}^{(k)} - \varphi_{ij}^{(k)}}{\varphi_{\tau}} \right) + \mu_n \varphi_{\tau} B \left( \frac{\varphi_{i,j-1}^{(k)} - \varphi_{ij}^{(k)}}{\varphi_{\tau}} \right)}{h_{x_2}^2} \right) * \tilde{\omega}_{i,j}^{(k)} - \\ & \frac{\mu_p \varphi_{\tau} B \left( \frac{\varphi_{ij}^{(k)} - \varphi_{i+1,j}^{(k)}}{\varphi_{\tau}} \right)}{h_{x_1}^2} * \tilde{\omega}_{i+1,j}^{(k)} - \frac{\mu_p \varphi_{\tau} B \left( \frac{\varphi_{ij}^{(k)} - \varphi_{i-1,j}^{(k)}}{\varphi_{\tau}} \right)}{h_{x_1}^2} * \tilde{\omega}_{i-1,j}^{(k)} - \frac{\mu_p \varphi_{\tau} B \left( \frac{\varphi_{ij}^{(k)} - \varphi_{i,j+1}^{(k)}}{\varphi_{\tau}} \right)}{h_{x_2}^2} * \tilde{\omega}_{i,j+1}^{(k)} - \\ & \frac{\mu_p \varphi_{\tau} B \left( \frac{\varphi_{ij}^{(k)} - \varphi_{i,j-1}^{(k)}}{\varphi_{\tau}} \right)}{h_{x_2}^2} * \tilde{\omega}_{i,j-1}^{(k)}, \quad i = \overline{2, NN}, \quad j = \overline{2, MM} \end{aligned}$$

după, au fost calculate următoarele valori intermediare la iterația curentă ( $k + 1$ )

$$\begin{aligned} \gamma_{p,ij}^{(k)} &= \sum_{i=2}^{NN} \sum_{j=2}^{MM} \omega_{p,ij}^{(k)} \cdot s_{p,ij}^{(k)} & \tilde{\gamma}_{p,ij}^{(k)} &= \sum_{i=2}^{NN} \sum_{j=2}^{MM} \tilde{\omega}_{p,ij}^{(k)} \cdot \tilde{s}_{p,ij}^{(k)} \\ t^{(k)} &= \sum_{i=2}^{NN} \sum_{j=2}^{MM} t_{p,ij}^{(k)} \cdot \tilde{t}_{p,ij}^{(k)} & \gamma^{(k)} &= \sum_{i=2}^{NN} \sum_{j=2}^{MM} \gamma_{p,ij}^{(k)} \cdot \tilde{\gamma}_{p,ij}^{(k)} & \alpha_p^{(k+1)} &= \frac{t^{(k)}}{\gamma^{(k)}} \end{aligned}$$

Pasul 4 Au fost recalculat componentele concentrației de goluri la iterația curentă ( $k + 1$ )

$$p_{ij}^{(k+1)} = p_{ij}^{(k)} + \alpha_p^{(k+1)} \omega_{ij}^{(k)}, \quad i = \overline{1, NN + 1}, \quad j = \overline{1, MM + 1}. \quad (3.58)$$

În nodurile de pe frontieră valorile funcției discrete  $p^{(k+1)}$  au fost aproximare conform relațiilor (3.16),(3.19).

Pasul 5 Au fost recalculat componentele reziduurilor pentru matricea sistemului și transpusa sa, respectiv, la iterația curentă ( $k + 1$ )

$$r_{p,ij}^{(k+1)} = r_{p,ij}^{(k)} - \alpha_p^{(k+1)} s_{p,ij}^{(k)} \quad \tilde{r}_{p,ij}^{(k+1)} = \tilde{r}_{p,ij}^{(k)} - \alpha_p^{(k+1)} \tilde{s}_{p,ij}^{(k)} \quad i = \overline{2, NN}, \quad j = \overline{2, MM}$$

după, au fost recalculat valorile intermediare

$$t^{(k+1)} = \sum_{i=2}^{NN} \sum_{j=2}^{MM} r_{p,ij}^{(k+1)} \cdot \tilde{r}_{p,ij}^{(k+1)} \quad \beta_p^{(k+1)} = \frac{t^{(k+1)}}{t^{(k)}}$$

Pasul 6 Au fost recalculați vectorii redirecționărilor pentru operatorul sistemului și transpusul său, respectiv, la iterația curentă ( $k + 1$ )

$$\omega_{p,ij}^{(k+1)} = r_{p,ij}^{(k+1)} + \beta_p^{(k+1)} \omega_{p,ij}^{(k)}, \quad \tilde{\omega}_{p,ij}^{(k+1)} = \tilde{r}_{p,ij}^{(k+1)} + \beta_p^{(k+1)} \tilde{\omega}_{p,ij}^{(k)} \quad i = \overline{2, NN}, \quad j = \overline{2, MM}$$

Pasul 7 Indicele iterației curente și-a mărit valoarea  $k = k + 1$  și s-a revenit la Pasul 2.

A fost determinată complexitatea algoritmului de modelare numerică a proceselor neliniare în dioda semiconductoare, cu aplicarea metodelor MGC și MGBiC, teoretic. Analizând algoritmi de realizare a unei iterații interne s-a stabilit că au fost efectuate, în cazul aplicării

MGC o operație de înmulțire a matricei la un vector și nouă operații asupra vectorilor (de adunare, scădere, înmulțire la o constantă, împărțire la o constantă), iar la aplicarea MGBiC trei operații de înmulțire a matricei la un vector și douăzeci și două operații asupra vectorilor (de adunare, scădere, înmulțire la o constantă, împărțire la o constantă). Dacă notăm prin  $nn \times nn$  ordinul matricei  $A$  și luând în calcul că este o matrice predominant cinci diagonală, numărul total de operații a fost calculat în baza următoarelor componente  $t_0 = 5n^{n^2} + 15nn - 3$ , ca număr de operații scalare necesare pentru calcularea valorilor inițiale. Pentru realizarea unei iterații interne în cazul MGC  $t_1 = nn^2 + 3nn - 2$  este numărul de adunări/scăderi ale scalarilor,  $t_2 = nn^2 + 6nn + 2$  numărul de înmulțiri/împărțiri ale scalarilor. Pentru realizarea unei iterații interne, în cazul MGBiC,  $t_1 = 2nn^2 + 9nn - 7$  este numărul de adunări/scăderi ale scalarilor,  $t_2 = 2nn^2 + 13nn$  numărul de înmulțiri/împărțiri ale scalarilor. Astfel, dacă  $k_0$  este numărul minim de iterații necesar pentru determinarea soluției cu exactitatea prestabilită, atunci numărul total de operații pentru calcularea soluției sistemului (3.1), (3.8), (3.15) este  $T = (10nn^2 + 53nn - 14) * k_0 + 5nn^2 + 15nn - 3$ .

Rezultate numerice, obținute în urma experimentelor asupra algoritmului modelării numerice a diodei semiconductoare cu utilizarea MGC și MGBiC:

a) Tabelul numărului mediu de iterații, efectuate pentru calculării soluțiilor cu exactitatea prestabilită de ordinul  $10^{-10}$ , obținut în urma măsurărilor experimentale asupra algoritmului numeric ce modelează matematic procesele neliniare în dioda semiconductoare (cazul MGC & MGBiC), implementat pe o rețea de noduri ( $16 \times 32$ ):

**Tabel 3.43: Numărul mediu de iterații. Cazul tripletului de necunoscute  $\{\varphi, n \text{ și } p\}$  cu aplicarea MGC & MGBiC**

nr. de iterații interne, $\varphi$	nr. de iterații interne $n$	nr. de iterații interne, $p$	nr. total de iterații	nr. de iterații externe	Durata (minute)
88	61	61	210	33	3

b) Suprafețele funcțiilor  $\varphi$ ,  $n$  și  $p$ , construite în baza rezultatelor experimentale, obținute la rezolvarea problemei diodei semiconductoare cu utilizarea MGC&MGBiC, sunt prezentate în Anexa 2.

### 3.3.4 Algoritmul modelării numerice a dispozitivului semiconductor cu aplicarea MPC2N și a MGBiC

Deoarece unele metode iterative aplicate la rezolvarea sistemelor algebrice liniare sunt suficient de sensibile la precondiționări astfel încât micșorarea pasului rețelei și creșterea

exactității erorii ar duce la instabilitatea calculelor, în cadrul acestui subcapitol, la etapa realizării ciclurilor interne în cadrul cărora sunt rezolvate sistemele algebrice liniare (3.27) în necunoscuta potențialului electrostatic ( $\varphi$ ), (3.28) în necunoscuta concentrației de electroni ( $n$ ) și (3.29) în necunoscuta concentrației de goluri ( $p$ ), fiecare fiind un sistem de ordinul  $(NN - 1)(MM - 1)$ , au fost aplicate metodele MPC2N și MGBiC, observând anterior o sensibilitate mai mica a lor. Ținem să menționăm că în cazul sistemelor (3.27), (3.28) a fost aplicată MPC2, iar la rezolvarea sistemului algebric (3.29) MGBiC (cazul sistemelor algebrice cu operatorul nesimetric).

La rezolvarea sistemul algebric liniar (3.27) cu aplicarea MPC2N, descrisă în Capitolul 2, ai cărei parametri Cebîșev  $\tau_{k+1} \in \mathfrak{M}_{k_0}$  au fost calculați conform relației (2.63) cu  $\tau_{k+1} \in \mathfrak{M}_{k_0}^{(optimal)}$  s-a obținut o nouă estimare a potențialului electrostatic ( $\varphi$ ), notată prin  $\varphi^{(k+1)}$ . În nodurile de pe frontieră valorile potențialului electrostatic ( $\varphi$ ) la iterația curentă ( $k + 1$ ), au fost approximate conform relațiilor (3.17).

La rezolvarea sistemul algebric liniar (3.28) cu aplicarea MPC2N, conform (2.18) ai cărei parametri Cebîșev  $\tau_{k+1} \in \mathfrak{M}_{k_0}$  au fost calculați în baza relațiilor (2.63) cu  $\tau_{k+1} \in \mathfrak{M}_{k_0}^{(optimal)}$ , s-a obținut o nouă estimare a concentrației de electroni ( $n$ ), notată prin  $n^{(k+1)}$ . În nodurile de pe frontieră valorile concentrației de electroni ( $n$ ) la iterația ( $k + 1$ ) au fost approximate conform relațiilor (3.18).

La rezolvarea sistemul algebric liniar (3.29) cu aplicarea MGBiC conform (3.58) s-a obținut o nouă estimare a concentrației de goluri ( $p$ ), notată prin  $p^{(k+1)}$ . În nodurile de pe frontieră valorile concentrației de goluri ( $p$ ) la iterația ( $k + 1$ ) au fost approximate conform relațiilor (3.19).

A fost stabilită complexitatea modelului cu aplicarea metodelor MPC2N și cea a MGBiC, teoretic. Analizând algoritmi de realizare a unei iterații interne s-a stabilit că au fost efectuate, în cazul aplicării MPC2N, o operații de înmulțire a matricei la un vector și trei operații asupra vectorilor (de adunare, înmulțire la o constantă, împărțire la o constantă), iar la aplicarea MGBiC trei operații de înmulțire a matricei la un vector și douăzeci și două operații asupra vectorilor (de adunare, scădere, înmulțire la o constantă, împărțire la o constantă). Dacă notăm prin  $nn \times nn$  ordinul matricei  $A$  și luând în calcul că este o matrice predominant cinci diagonală, numărul total de operații a fost calculat în baza următoarelor componente  $t_0 = 5nn^2 + 15nn - 3$ , ca număr de operații scalare necesare pentru calcularea valorilor inițiale. Pentru realizarea unei iterații interne, în cazul MPC2N,  $t_1 = 6nn$  numărul de adunări/scăderi ale scalarilor,  $t_2 = 6nn$  numărul de înmulțiri/împărțiri ale scalarilor. Pentru realizarea unei iterații interne, în cazul MGBiC,  $t_1 = 2nn^2 + 9nn - 7$ , numărul de adunări/scăderi ale scalarilor,  $t_2 = 2nn^2 + 13nn$ , numărul

de înmulțiri/împărțiri ale scalarilor. Astfel, dacă  $k_0$  este numărul minim de iterații, necesar pentru determinarea soluției cu exactitatea prestabilită, atunci numărul total de operații, pentru calcularea soluției sistemului (3.1), (3.8), (3.15), este  $T = (4nn^2 + 46nn - 7) * k_0 + 5nn^2 + +15nn - 3$ .

Rezultate numerice obținute în urma experimentelor asupra modelului numeric al diodei semiconductoare cu utilizarea MPC2N și a MGBiC:

a) Tabelul numărului mediu de iterații, efectuate pentru calculării soluțiilor cu exactitatea prestabilită de ordinul  $10^{-10}$ , obținut în urma măsurărilor experimentale asupra algoritmului numeric ce modelează matematic procesele neliniare în dioda semiconductoare (cazul MPC2N & MGBiC), implementat pe o rețea de noduri ( $16 \times 32$ ):

**Tabel 3.5: Numărul mediu de iterații. Cazul tripletului de necunoscute {  $\varphi$ ,  $n$  și  $p$  } cu aplicarea MPC2N & MGBiC**

nr. de iterații interne, $\varphi$	nr. de iterații interne, $n$	nr. de iterații interne, $p$	nr. total de iterații	nr. de iterații externe	Durata (minute)
46201	25451	131	71783	67	540

b) Suprafețele funcțiilor  $\varphi$ ,  $n$  și  $p$ , construite în baza măsurărilor experimentale, obținute la rezolvarea problemei diodei semiconductoare cu utilizarea metodelor MPC2N&MGBiC, sunt prezentate în *Anexa 2*.

### **3.3.5 Algoritmul numeric cu aplicarea Metodelor Parametrilor Cebîșev pe 3 Nivele și cea a Gradientilor Bi Conjugați**

În tendința de a elabora cei mai eficienți algoritmi de modelare numerică a proceselor neliniare în dispozitivul semiconductor, s-a căutat căi de creare a algoritmilor mai puțin sensibili la preconditionări. O cale de realizare a acestei idei și de elaborare a algoritmului ce modelează funcționalitatea diodei semiconductoare a fost utilizarea combinată a metodelor iterative. În cadrul acestui subcapitol, combinat, la rezolvarea sistemelor algebrice obținute vor fi utilizate Metodele Parametrilor Cebîșev pe 2 Nivele (MPC3N) și cea a Gradientilor Bi Conjugați (MGBiC).

La rezolvarea sistemelor (3.27), (3.28) a fost aplicată MPC3N (aplicabilă în cazul sistemelor algebrice cu operatorul simetric sau special), iar la rezolvarea sistemului (3.29) MGBiC (cazul sistemelor algebrice cu operatorul nesimetric).

La rezolvarea sistemul algebric liniar (3.27), cu aplicarea MPC3N, descrisă în Capitolul 2 (2.79), (2.80) s-a obținut o nouă estimare la iterația curentă a potențialului electrostatic ( $\varphi$ ),



notată prin  $\varphi^{(k+1)}$ . În nodurile de pe frontieră valorile potențialului electrostatic ( $\varphi$ ), la iterația ( $k + 1$ ), au fost approximate conform relațiilor (3.16),(3.17).

La rezolvarea sistemul algebric liniar (3.28) cu aplicarea MPC3N conform (2.79), (2.80) s-a obținut o nouă estimare a concentrației de electroni ( $n$ ) la iterația curentă, notată prin  $n^{(k+1)}$ . În nodurile de pe frontieră valorile concentrației de electroni ( $n$ ), la iterația ( $k + 1$ ), au fost approximate conform relațiilor (3.16),(3.18).

La rezolvarea sistemul algebric liniar (3.29) cu aplicarea MGBiC, pașii de realizare ai căreia sunt descriși în (3.58), s-a obținut o nouă estimare a concentrației de goluri ( $p$ ) la iterația curentă, notată prin  $p^{(k+1)}$ . În nodurile de pe frontieră valorile concentrației de goluri ( $p$ ), la iterația ( $k + 1$ ), au fost approximate conform relațiilor (3.16),(3.19).

A fost stabilită complexitatea algoritmului de realizare a modelului numeric cu aplicarea metodelor iterative MPC3N și cea a MGBiC, teoretic. Analizând algoritmi de realizare a unei iterații interne s-a stabilit că au fost efectuate, în cazul aplicării MPC3N, două operații de înmulțire a matricei la un vector și cinci operații asupra vectorilor (adunare, scădere, înmulțire la o constantă, împărțire la o constantă), iar la aplicarea MGBiC trei operații de înmulțire a matricei la un vector și douăzeci și două operații asupra vectorilor (de adunare, scădere, înmulțire la o constantă, împărțire la o constantă). Dacă notăm prin  $nn \times nn$  ordinul matricei  $A$  și luând în calcul că este o matrice predominant cinci diagonală, numărul total de operații a fost calculat în baza următoarelor componente  $t_0 = 5nn^2 + 15nn - 3$ , ca număr de operații scalare necesare pentru calcularea valorilor inițiale. Pentru realizarea unei iterații interne în cazul MPC3N  $t_1 = 10 * nn$ , numărul de adunări/scăderi ale scalarilor,  $t_2 = 16 * nn$ , numărul de înmulțiri/împărțiri ale scalarilor. Pentru realizarea unei iterații interne în cazul MGBiC  $t_1 = 2nn^2 + 9nn - 7$ , numărul de adunări/scăderi ale scalarilor,  $t_2 = 2nn^2 + 13nn$ , numărul de înmulțiri/împărțiri ale scalarilor.

Astfel, dacă  $k_0$  este numărul minim de iterații necesar pentru determinarea soluției cu exactitatea prestabilită atunci numărul total de operații pentru calcularea soluției sistemului (3.1), (3.8), (3.15), este  $T = (4nn^2 + 74nn - 7) * k_0 + 5nn^2 + 15nn - 3$ .

Rezultate numerice, obținute în urma experimentelor asupra algoritmului modelării numerice a diodei semiconductoare cu utilizarea MPC3N și a MGBiC:

a) Tabelul numărului mediu de iterații, efectuate pentru calculării soluțiilor cu exactitatea prestabilită de ordinul  $10^{-10}$ , obținut în urma măsurărilor experimentale asupra algoritmului numeric ce modelează matematic procesele neliniare în dioda semiconductoare (cazul MPC2N & MGBiC), implementat pe o rețea de noduri ( $16 \times 32$ ):

**Tabel 3.6: Numărul mediu de iterații. Cazul tripletului de necunoscute {  $\varphi$ ,  $n$  și  $p$  } cu aplicarea MPC3N & MGBiC**

nr. de iterații interne, $\varphi$	nr. de iterații interne, $n$	nr. de iterații interne, $p$	nr. total de iterații	nr. de iterații externe	Durata (minute)
30531	29625	453259	515525	271	1260

b) Suprafețele funcțiilor  $\varphi$ ,  $n$  și  $p$ , construite în baza rezultatelor experimentale obținute la rezolvarea problemei diodei semiconductoare cu utilizarea MPC3N&MGBiC, sunt prezentate în Anexa 2.

Pentru compararea algoritmilor elaborați și descriși în acest capitol au fost folosiți următorii indicatori: 1) numărul de operații aritmetice necesare pentru calcularea unei noi aproximări a funcțiilor necunoscute la o iterație, 2) numărul mediu de iterații interne, 3) numărul mediu de iterații externe, 4) timpul mediu necesar pentru realizarea experimentului numeric, 5) ordinul de convergență al metodei.

Rezultatele comparării sunt expuse în tabelul ce urmează.

**Tabel 3.7: Numărul mediu de iterații. Cazul tripletului de necunoscute {  $\varphi$ ,  $n$  și  $p$  } pentru fiecare metodă iterativă aplicată în Capitolul 3.**

Modelul simulării	Nr. de operații necesare	Nr de iterații interne, $k_0$	Nr de iterații externe	Durata experimentului (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	$O(h^1)$
<b>MGC+MGBiC</b>	<b><math>10nn^2+53nn-14</math></b>	<b>210</b>	<b>33</b>	<b>3</b>	<b><math>O(h^2)</math></b>
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,  $k_0$  numărul mediu de iterații interne,  $h$  pasul rețelei utilizată pentru discretizarea ecuațiilor modelului matematic.

### 3.4 Concluzii la capitolul 3

Scopul acestei cercetări a fost elaborarea și testarea algoritmilor ce modelează numeric procesele neliniare în dioda semiconductoare, cu identificarea celor mai eficienți.

Urmând realizarea scopului propus în acest capitol au fost descriși alți șase algoritmi, cu identificarea celui mai eficient și argumentarea alegerii făcute.

Majoritatea metodelor numerice iterative converg suficient de repede dacă matricea sistemului este bine condiționată sau are un număr mic de valori proprii. În caz contrar, cazul problemei cercetării (1.17)-(1.19) cu condiții la frontieră de două tipuri Dirichlet (1.39) și Neumann (1.40) și datorită acumulării de erori, chiar dacă conform teoriei metodele ar trebui să

conveargă dimpotrivă, diverg. În cadrul acestui capitol, pentru înlăturarea efectelor negative, cauzate de ”rea condiționarea matricelor” și acumularea erorii exponențial, au fost identificate și ajustate tehnici, după aplicarea cărora au fost obținuți algoritmi convergenți, stabili și eficienți.

S-a observat că instabilitatea calculelor mai poate fi evitată, în mod satisfăcător și printr-o repornire a procesului iterativ, imediat înainte de etapa ”aproape de instabilitate”, trecând la o metodă mai robustă (dar de obicei mai costisitoare).

La finalul capitolului, analizând datele din **Tabelul 3.7**, ca cel mai eficient algoritm de modelare numerică a proceselor neliniare în dioda semiconductoare, dintre cei șase algoritmi elaborați, cu implementarea lor prin crearea softului corespunzător și testării acestora, descriși în cadrul acestui capitol, a fost identificat algoritmul ce utilizează combinat metodele Gradientilor Conjugați și cea a Gradientilor Bi-Conjugați.

## 4 MODELAREA MATEMATICĂ A PROCESELOR NELINIARE ÎN DISPOZITIVUL SEMICONDUCTOR CU APLICAREA METODEI NEWTON

Metodele numerice sunt acele tehnici care permit transformarea modelelor fizice în modele numerice (cele ce operează pe spații finite) și presupun algoritmi ce pot fi ușor transformați în coduri sursă, folosind diferite limbaje de programare. Etapa trecerii de la modelul fizic la cel numeric și anume cu aplicarea unei metode numerice, se face, la general, în baza unor aproximări. Prin urmare, soluția obținută în urma aplicării metodelor numerice este, de cele mai multe ori, una aproximativă. Ea poartă numele de soluție numerică și este diferită de cea exactă.

Problemele pot fi bine condiționate sau slab condiționate. Când variații mici ale datelor de intrare determină variații mici ale soluției problema este bine condiționată, iar când determină variații mari ale soluției este slab condiționată.

Conceptele de stabilitate sau instabilitate numerică se referă la algoritmi ce însoțesc metodele numerice. Algoritmii care se dovedesc a nu amplifica erorile în timpul calculelor se spune că sunt stabili din punct de vedere numeric, respectiv, instabili dacă produc un astfel de efect.

În cazul algoritmilor ce oferă soluții aproximative și care converg către o limită finită, datorită cumulării erorilor de rotunjire, soluția exactă poate să se depărteze uneori chiar foarte mult de această limită. Și în acest caz spunem că algoritmul este instabil.

Cele mai mari erori ce ar putea să apară la rezolvarea pe cale numerică a problemelor s-ar obține în cazul când ar fi aplicat un algoritm instabil la rezolvarea unei probleme slab condiționate. Astfel de situații pot fi evitate prin găsirea metodelor alternative de soluționare mai stabile și mai bine condiționate, dacă acestea există.

Una dintre cele mai folosite tehnici de rezolvare a ecuațiilor neliniare este metoda Newton, denumită și metoda Newton-Raphson sau metoda tangentelor. Spre deosebire de alte metode, pentru fiecare punct din șirul aproximațiilor  $(x^{(k+1)})$  este necesar atât evaluarea funcționalei ce definește ecuația cât și a derivatei acesteia în aceste puncte.

Pentru cazul funcționalei multidimensionale metoda Newton ar utiliza următoarea formulă de recurență

$$\begin{aligned} x^{(k+1)} &= (x_1^{(k+1)}, x_2^{(k+1)}, \dots, x_m^{(k+1)}), \quad k = 0, 1, 2, 3, \dots \\ x^{(k+1)} &= x^{(k)} - \left( J(f(x^{(k)})) \right)^{-1} * f(x^{(k)}), \end{aligned} \quad (4.1)$$

unde  $J(f(x^{(k)}))$  este Jacobinul funcționalei  $f$  și are reprezentarea

$$J(f(x^{(k)})) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1}(x^{(k)}) & \frac{\partial f_1}{\partial x_2}(x^{(k)}) & \frac{\partial f_1}{\partial x_3}(x^{(k)}) & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial x_m}(x^{(k)}) \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1}(x^{(k)}) & \frac{\partial f_2}{\partial x_2}(x^{(k)}) & \frac{\partial f_2}{\partial x_3}(x^{(k)}) & \dots & \frac{\partial f_2}{\partial x_m}(x^{(k)}) \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial f_m}{\partial x_1}(x^{(k)}) & \frac{\partial f_m}{\partial x_2}(x^{(k)}) & \frac{\partial f_m}{\partial x_3}(x^{(k)}) & \dots & \frac{\partial f_m}{\partial x_m}(x^{(k)}) \end{pmatrix} \quad (4.2)$$

Condițiile de convergență pentru metoda Newton sunt relativ complexe, ca formă, se referă nu numai la funcționala  $f(x)$  ci și la primele sale două derivate  $f'(x)$  și  $f''(x)$ . Marele avantaj al metodei Newton este rata mare de convergență.

Cu utilizarea metodei Newton, în apropierea soluției exacte se asigură practic dublarea numărului de cifre exacte ale soluției, calculate iterativ.

Această proprietate "remarcabilă" este "cartea de vizită" ce recomandă metoda Newton ca cea mai eficientă metodă de rezolvare a unei ecuații neliniare, pentru care este posibilă evaluarea derivatei funcționalei acesteia  $f'(x)$ .

Trebuie de remarcat fraza anterioară "In apropierea soluției exacte..." și de reamintit condițiile de convergență, care se refera atât la funcționala  $f(x)$  cât și la primele sale două derivate. Din aceste cauze, despre metoda Newton se spune ca are proprietăți locale de convergență foarte bune, dar se poate comporta "rău" la nivel global. Metoda Newton totuși poate fi aplicată ca o procedură terminală, pentru rafinarea eficientă și foarte rapidă a unei aproximații obținute prin aplicarea, in prima fază, a unei alte metode, mai puțin sensibile din punctul de vedere al convergenței, dar in principiu mai lentă.

Problema dispozitivului semiconductor, formulată matematic în Capitolul 1, este o problemă neliniară. Rezolvarea ei se mai complică prin faptul că are două tipuri de condiții la frontieră, Dirichlet și Neumann, ce acționează pe porțiuni disjuncte. Pentru rezolvarea ei, la elaborarea algoritmilor numerici, au fost soluționate mai multe subprobleme. Și anume, în cadrul cercetării au fost obținute rezultate la soluționarea următoarelor subprobleme:

*Subproblema 1.* Realizarea unor analogi numerici reușiți pentru formularea matematică a problemei dispozitivului semiconductor, ce reprezintă un sistem de trei ecuații în derivate parțiale neliniare cu două tipuri de condiții la frontieră, care acționează disjunct.

În Capitolul 2, la discretizarea modelului matematic al dispozitivului semiconductor, un model Drift-diffusion formulat în necunoscutele potențialului electrostatic ( $\varphi$ ), cvasi-potențialelor lui Fermi pentru electroni ( $\varphi_n$ ) și goluri ( $\varphi_p$ ), au fost utilizate schemele cu diferențe. La realizarea analogului numeric, după discretizarea sistemului (1.17)-(1.19) și a

condițiilor la frontieră (1.39), (1.40) s-a trecut la sistemul algebric neliniar (2.1), (2.5), (2.9), cu analogii discreți ai condițiilor la frontieră (2.10)-(2.13). În Capitolul 3, la discretizarea modelului matematic al dispozitivului semiconductor, model Drift-diffusion formulat în necunoscutele potențialului electrostatic ( $\varphi$ ), a concentrațiilor de electroni ( $n$ ) și goluri ( $p$ ) au fost utilizate schemele cu diferențe și schema lui Scharfetter-Gummel. Ca rezultat, după discretizarea sistemului (1.17)-(1.19) cu condițiile la frontieră (1.39), (1.40) s-a obținut sistemul algebric neliniar (3.1), (3.8), (3.15) cu analogii discreți la frontieră (3.16)-(3.19).

*Subproblema 2.* Liniarizarea sistemelor algebrice obținute după realizarea analogilor discreți pentru modelul matematic al dispozitivului semiconductor.

În Capitolul 2, după aplicarea tehnicii de liniarizare și anume ideea algoritmului Gummel, s-a trecut de la sistemul algebric neliniar (2.1), (2.5), (2.9) la sistemul algebric liniar (2.28)-(2.30) cu condițiile la frontieră (2.10)-(2.13). În Capitolul 3, după liniarizare cu aplicarea ideii algoritmului Gummel s-a trecut de la sistemul algebric neliniar (3.1), (3.8), (3.15) la sistemul algebric liniar (3.27)-(3.29) cu condițiile la frontieră (3.16)-(3.19).

*Subproblema 3.* Separarea sistemului algebric liniar, având ca necunoscută un set de trei funcții, în trei sisteme independente, fiecare având ca necunoscută doar una dintre funcțiile necunoscute ale sistemului rezolvat.

Astfel, algoritmi descriși în Capitolul 2 realizează trecerea de la rezolvarea sistemului (2.28)-(2.30) cu necunoscuta  $\{\varphi, \varphi_n, \varphi_p\}$  la rezolvarea a trei sisteme independente, (2.28) în necunoscuta  $\varphi$ , (2.29) în necunoscuta  $\varphi_n$  și (2.30) în necunoscuta  $\varphi_p$ . În Capitolul 3, algoritmi descriși realizează trecerea de la rezolvarea sistemului (3.27)-(3.29), având ca necunoscută  $\{\varphi, n, p\}$ , la rezolvarea a trei sisteme independente, (3.27) în necunoscuta  $\varphi$ , (3.28) în necunoscuta  $n$  și (3.30) în necunoscuta  $p$ . Separarea a fost obținută în urma aplicării tehnicii Gummel, la soluționarea *Subproblemei 2*.

*Subproblema 4.* Rezolvarea sistemelor algebrice liniare separate, prin diferite metode iterative aplicabile, realizate în cadrul unor cicluri interne.

În Capitolul 4 va fi descrisă o altă abordare a soluționării problemei dispozitivului semiconductor, realizată în cercetare într-o variantă și care diferă de cea aplicată în capitolele anterioare.

După cum a fost menționat, modelarea matematică a problemei dispozitivului semiconductor presupune rezolvarea unui sistem de ecuații în derivate parțiale neliniare, cu condiții la frontieră de două tipuri. Soluționarea ei a mai presupus elaborarea algoritmilor numerici, care soluționează eficient subproblemele enumerate mai sus. Problema dispozitivului

semiconductor a fost rezolvată în cadrul cercetării, iar în Capitolele 2 și 3 au fost descriși doisprezece algoritmi numerici, cu identificarea celor mai eficienți. În acest capitol va fi descris încă un algoritm, care rezolvă aceleași subprobleme, dar diferit și anume cu aplicarea metodei Newton.

Considerând cazul diodei semiconductoare din siliciu, sistemul de ecuații în derivate parțiale, care descriu funcționalitatea ei (de conductibilitate), formulat în variabilele potențialului electrostatic ( $\varphi$ ), a concentrațiilor de electroni ( $n$ ) și goluri ( $p$ ), este sistemul (1.17)-(1.19) cu condițiile la frontieră (1.39), (1.40). Pentru discretizarea ecuațiilor diferențiale au fost folosite diferențelor finite și schema lui Scharfetter-Gummel. Astfel a fost obținut analogul discret al problemei dispozitivului semiconductor și anume sistemul algebric neliniar (3.1), (3.8), (3.15) cu condițiile la frontieră (3.27)-(3.29).

Vor fi menționate câteva direcții de tratare a soluționării problemei dispozitivului semiconductor cu aplicarea metodei Newton, unele dintre ele nefiind realizate în cadrul acestei cercetări, dar propuse pentru o viitoare cercetare.

*Algoritmul 1 pentru modelarea numerică a dispozitivului semiconductor, cu aplicarea metodei Newton.*

Pasul 1. Aplicarea ideii algoritmului Newton, pentru liniarizarea sistemului de ecuații în derivate parțiale nelineare (1.17)-(1.19) și trecerea la un sistem de ecuații în derivate parțiale lineare.

Pasul 2. Discretizarea ecuațiilor în derivate parțiale lineare, folosind diferențele finite și schema lui Scharfetter-Gummel.

Pasul 3. Rezolvarea sistemului algebric linear obținut.

*Algoritmul 2 pentru modelarea numerică a dispozitivului semiconductor, cu aplicarea metodei Newton.*

Pasul 1. Discretizarea ecuațiilor diferențiale nelineare ale sistemului (1.17)-(1.19), folosind diferențele finite și schema lui Scharfetter-Gummel.

Pasul 2. Aplicarea ideii algoritmului Newton, pentru liniarizarea sistemului algebric neliniar și trecerea la un sistem algebric linear.

Pasul 3. Rezolvarea sistemului algebric linear, obținut după realizarea celor pașilor anteriori.

Pentru o mai bună înțelegere a algoritmilor propuși, descrierea lor a fost redată în schema din Anexa 3. Schema propune un șir de algoritmi numerici ce modelează matematic procesele neliniare în dispozitivul semiconductor, cu aplicarea metodei Newton. În cadrul cercetării a fost

realizat doar unul dintre ei (evidențiat cu culoarea oranj). Există așteptări bazate pe teorii și rezultatele obținute în mod practic că și algoritmi nerealizați din schemă vor da rezultate și că printre ei pot fi identificați și alți algoritmi eficienți. Schema poate fi extinsă, cu utilizarea metodelor directe de rezolvare a sistemelor, spre exemplu.

Varianta geometrică a metodei Newton nu poate fi aplicată în cazul sistemelor multe dimensionale. În consecință, ideea metodei analitice Newton, aplicată în cercetare la crearea algoritmilor numerici pentru modelarea matematică a dispozitivului semiconductor, va fi descrisă succint în continuare.

Fie dat sistemul

$$\begin{cases} f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \\ f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \\ \dots \\ f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \end{cases} \quad \bar{X} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \dots \\ x_n \end{pmatrix} \quad \bar{f} = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \dots \\ f_n \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \bar{f}(\bar{X}) = 0$$

Notând prin  $\bar{\xi}$  soluția exactă a sistemului  $\Rightarrow \bar{f}(\bar{\xi}) = 0$ .

Presupunem că la iterația  $(p)$  cunoaștem  $\bar{X}^{(p)} \Rightarrow \bar{\xi} = \bar{X}^{(p)} + \bar{\delta}^{(p)} \Rightarrow \bar{\delta}^{(p)} = \bar{\xi} - \bar{X}^{(p)}$ .

Prin urmare  $\bar{f}(\bar{\xi}) = 0 \Rightarrow \bar{f}(\bar{X}^{(p)} + \bar{\delta}^{(p)}) = 0 \Rightarrow \bar{f}(\bar{X}^{(p)}) + \bar{f}'(\bar{X}^{(p)})\bar{\delta}^{(p)} = 0$

unde  $\bar{f}'(\bar{X}^{(p)} + \bar{\delta}^{(p)}) = 0 \Rightarrow$

$$f_1'(x_1^{(p)} + \delta_1^{(p)}, x_2^{(p)} + \delta_2^{(p)}, \dots, x_n^{(p)} + \delta_n^{(p)}) = 0 \Rightarrow f_1(x_1^{(p)}, x_2^{(p)}, \dots, x_n^{(p)}) + \delta_1^{(p)} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} \Big|_{\bar{X}^{(p)}} +$$

$$\delta_2^{(p)} \frac{\partial f_1}{\partial x_2} \Big|_{\bar{X}^{(p)}} + \dots + \delta_n^{(p)} \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \Big|_{\bar{X}^{(p)}} = 0$$

$$f_2'(x_1^{(p)} + \delta_1^{(p)}, x_2^{(p)} + \delta_2^{(p)}, \dots, x_n^{(p)} + \delta_n^{(p)}) = 0 \Rightarrow f_2(x_1^{(p)}, x_2^{(p)}, \dots, x_n^{(p)}) + \delta_1^{(p)} \frac{\partial f_2}{\partial x_1} \Big|_{\bar{X}^{(p)}} +$$

$$\delta_2^{(p)} \frac{\partial f_2}{\partial x_2} \Big|_{\bar{X}^{(p)}} + \dots + \delta_n^{(p)} \frac{\partial f_2}{\partial x_n} \Big|_{\bar{X}^{(p)}} = 0$$

...

$$f_n'(x_1^{(p)} + \delta_1^{(p)}, x_2^{(p)} + \delta_2^{(p)}, \dots, x_n^{(p)} + \delta_n^{(p)}) = 0 \Rightarrow f_n(x_1^{(p)}, x_2^{(p)}, \dots, x_n^{(p)}) + \delta_1^{(p)} \frac{\partial f_n}{\partial x_1} \Big|_{\bar{X}^{(p)}} +$$

$$\delta_2^{(p)} \frac{\partial f_n}{\partial x_2} \Big|_{\bar{X}^{(p)}} + \dots + \delta_n^{(p)} \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \Big|_{\bar{X}^{(p)}} = 0$$

Astfel  $\bar{f}'(\bar{X}^{(p)}) = \bar{J}(\bar{X}^{(p)})$ , unde  $\bar{J}$  – matricea lui Jacoby și are forma:

$$J(\bar{X}^{(p)}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1}(\bar{X}^{(p)}) & \frac{\partial f_1}{\partial x_2}(\bar{X}^{(p)}) & \frac{\partial f_1}{\partial x_3}(\bar{X}^{(p)}) & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial x_m}(\bar{X}^{(p)}) \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1}(\bar{X}^{(p)}) & \frac{\partial f_2}{\partial x_2}(\bar{X}^{(p)}) & \frac{\partial f_2}{\partial x_3}(\bar{X}^{(p)}) & \dots & \frac{\partial f_2}{\partial x_m}(\bar{X}^{(p)}) \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial f_m}{\partial x_1}(\bar{X}^{(p)}) & \frac{\partial f_m}{\partial x_2}(\bar{X}^{(p)}) & \frac{\partial f_m}{\partial x_3}(\bar{X}^{(p)}) & \dots & \frac{\partial f_m}{\partial x_m}(\bar{X}^{(p)}) \end{pmatrix}$$



$$\begin{aligned} \bar{f}(\bar{X}^{(p)}) + J(\bar{X}^{(p)})\bar{\delta}^{(p)} &= 0 \Rightarrow \bar{\delta}^{(p)} = -J^{-1}(\bar{X}^{(p)})\bar{f}(\bar{X}^{(p)}) \\ \bar{X}^{(p+1)} &= \bar{X}^{(p)} + \bar{\delta}^{(p)} \Rightarrow \bar{X}^{(p+1)} = \bar{X}^{(p)} - J^{-1}(\bar{X}^{(p)})\bar{f}(\bar{X}^{(p)}), \quad p = 0, 1, 2, \dots \end{aligned}$$

Revenind la rezolvarea problemei dispozitivului semiconductor (1.17)-(1.19), cu condițiile la frontieră (1.39),(1.40), valorile inițiale ale potențialului electrostatic ( $\varphi$ ), concentrațiilor de electroni ( $n$ ) și goluri ( $p$ ) au fost calculate conform sistemului (3.16) cu  $V_a = 0$  pe întreg domeniul de definiție  $\bar{\Omega}$  și notate  $\varphi^{(in)}$ ,  $n^{(in)}$ ,  $p^{(in)}$ .

La următoarea etapă a fost organizat un ciclu extern în cadrul căruia, la fiecare iterație, cu pași mici, tensiunea aplicată la anod a fost mărită, iar valorile funcțiilor necunoscute au fost recalculat în condițiile echilibrului termodinamic și notate prin  $\varphi^{(m+1)}$ ,  $n^{(m+1)}$ ,  $p^{(m+1)}$ , unde  $(m + 1)$  iterația curentă a ciclului extern.

În cadrul ciclului extern a fost organizat ciclul ce rezolvă sistemul algebric neliniar (3.1), (3.8), (3.15) de ordinul  $(3 * NN) \times (3 * MM)$  cu condițiile la frontieră (3.17)-(3.19). Valorile inițiale ale funcțiilor necunoscute în cadrul acestui ciclu au fost egale cu valorile curente ale ciclului extern  $\varphi^{(n+1)} = \varphi^{(m+1)}$ ,  $n^{(n+1)} = n^{(m+1)}$ ,  $p^{(n+1)} = p^{(m+1)}$ , unde  $(n + 1)$  este iterația curentă a ciclului cu  $n = 0$ .

În cadrul ciclului ce rezolvă sistemul algebric neliniar de ordinul  $(3 * NN) \times (3 * MM)$  au fost organizate trei cicluri interne, consecutive, pentru rezolvarea a câte un sistem algebric liniar de ordinul  $(NN - 1) \times (MM - 1)$ . Valorile inițiale ale funcțiilor necunoscute, pentru fiecare ciclu intern, au fost egale cu valorile curente ale ciclului ce le conține  $\varphi^{(old)} = \varphi^{(n+1)}$ ,  $n^{(old)} = n^{(n+1)}$ ,  $p^{(old)} = p^{(n+1)}$ , unde  $(old)$  este iterația precedentă a ciclului intern, iar  $(n + 1)$  iterația curentă a ciclului superior pentru rezolvarea sistemului de ordinul  $(3 * NN) \times (3 * MM)$ .

În cazul sistemului (3.1) au fost folosite notațiile:

$\overline{\varphi^{(ex)}}(x_1, x_2)$  soluția exactă a sistemului (3.1),  $\overline{\varphi^{(old)}}(x_1, x_2)$  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.

Prin urmare, sunt adevărate relațiile:

$$\overline{\varphi^{(ex)}}(x_1, x_2) = \overline{\varphi^{(in)}}(x_1, x_2) + \bar{\delta}_\varphi(x_1, x_2), \quad \text{pentru prima iterație} \quad (4.4)$$

$$\overline{\varphi^{(new)}}(x_1, x_2) = \overline{\varphi^{(old)}}(x_1, x_2) + \bar{\delta}_\varphi(x_1, x_2), \quad \text{pentru iterația curentă} \quad (4.5)$$

Liniarizarea ecuațiilor sistemului algebric, folosind ideea algoritmului metodei Newton, a fost realizată prin substituirea relației (4.5) în sistemul (3.1). Pentru separarea sistemului (3.1) de celelalte două sisteme algebrice (3.8) și (3.15), a fost folosită ideea algoritmului Gummel, în

calitate de necunoscută a rămas funcția  $\overline{\varphi^{(new)}}(x_1, x_2)$  exprimată prin relația (4.5), celelalte două necunoscute 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 sistemul algebric linear în necunoscuta  $\overline{\delta}_\varphi(x_1, x_2)$

$$\left(\frac{2\varepsilon}{h_{x_1}^2} + \frac{2\varepsilon}{h_{x_2}^2}\right) \delta_{\varphi,i,j} - \frac{\varepsilon}{h_{x_1}^2} \delta_{\varphi,i+1,j} - \frac{\varepsilon}{h_{x_1}^2} \delta_{\varphi,i-1,j} - \frac{\varepsilon}{h_{x_2}^2} \delta_{\varphi,i,j+1} - \frac{\varepsilon}{h_{x_2}^2} \delta_{\varphi,i,j-1} = -\left(\frac{2\varepsilon}{h_{x_1}^2} + \frac{2\varepsilon}{h_{x_2}^2}\right) \varphi_{i,j}^{(old)} + \frac{\varepsilon}{h_{x_1}^2} \varphi_{i+1,j}^{(old)} + \frac{\varepsilon}{h_{x_1}^2} \varphi_{i-1,j}^{(old)} + \frac{\varepsilon}{h_{x_2}^2} \varphi_{i,j-1}^{(old)} + \frac{\varepsilon}{h_{x_2}^2} \varphi_{i,j+1}^{(old)} + q(p_{i,j}^{(old)} - n_{i,j}^{(old)} + N_{i,j}) \quad (4.6)$$

Rezolvând sistemul algebric (4.6), prin una dintre metodele numerice iterative, în cadrul unui ciclu intern inferior, a fost calculată valoarea  $\overline{\delta}_\varphi(x_1, x_2)$  cu exactitatea prestabilită. În baza noii valori  $\overline{\delta}_\varphi(x_1, x_2)$  a fost recalculată noua aproximare pentru potențialul electrostatic

$$\overline{\varphi^{(new)}}(x_1, x_2) = \overline{\varphi^{(old)}}(x_1, x_2) + \overline{\delta}_\varphi(x_1, x_2) \quad (4.7)$$

Noua valoarea a potențialului electrostatic ( $\overline{\varphi^{(new)}}$ ) a fost obținută iterativ, până la atingerea exactității prestabilite.

La ieșirea din ciclul intern (4.6), (4.7) au fost calculate valorile curente ale potențialului electrostatic ( $\overline{\varphi^{(new)}}$ ) în nodurile de pe frontieră, conform relațiilor (3.16),(3.17). Valoarea potențialului electrostatic ( $\overline{\varphi^{(n+1)}}$ ) în cadrul ciclului comun celor trei funcții necunoscute a primit valoarea potențialului electrostatic obținută în cadrul ciclului intern  $\overline{\varphi^{(n+1)}} = \overline{\varphi^{(new)}}$ .

Cazul sistemului algebric nelinier (3.8) a fost tratat asemănător. Au fost folosite notațiile:  $\overline{n^{(ex)}}(x_1, x_2)$  soluția exactă a sistemului (3.8),  $\overline{n^{(old)}}(x_1, x_2)$  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 și  $\overline{\delta}_n(x_1, x_2)$  eroarea.

Astfel, sunt adevărate relațiile

$$\overline{n^{(ex)}}(x_1, x_2) = \overline{n^{(in)}}(x_1, x_2) + \overline{\delta}_n(x_1, x_2), \quad \text{pentru prima iterație} \quad (4.8)$$

$$\overline{n^{(new)}}(x_1, x_2) = \overline{n^{(old)}}(x_1, x_2) + \overline{\delta}_n(x_1, x_2), \quad \text{pentru iterația curentă} \quad (4.9)$$

Liniazarea sistemului algebric (3.8) folosind ideea algoritmului metodei Newton a fost realizată prin substituirea relației (4.9) în sistemul (3.8). Separarea sistemului algebric (3.8) de celelalte două sisteme (3.1), (3.15) a fost realizată cu aplicarea algoritmului lui Gummel, în calitate de necunoscută a rămas concentrația de electroni  $\overline{n^{(new)}}(x_1, x_2)$  exprimată prin relația (4.9), celelalte două funcții 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.

A fost obținut sistemul algebric linear în necunoscuta  $\overline{\delta}_n(x_1, x_2)$

$$\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)} + \\
& \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}
\end{aligned} \tag{4.10}$$

După rezolvarea sistemului (4.10), folosind una dintre metodele iterative eficiente, în cadrul unui ciclu intern, a fost obținută valoarea pentru  $\bar{\delta}_n(x_1, x_2)$  cu exactitatea prestabilită. După, a fost estimată noua valoare a concentrației de electroni, conform expresiei

$$\overline{n^{(new)}}(x_1, x_2) = \overline{n^{(old)}}(x_1, x_2) + \bar{\delta}_n(x_1, x_2) \tag{4.11}$$

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

La ieșirea din ciclul intern (4.10), (4.11) au fost calculate valorile curente ale concentrației de electroni  $n^{(new)}$  în nodurile de pe frontieră, conform relațiilor (3.16),(3.18). Iar valoarea concentrației de electroni  $n^{(n+1)}$  din ciclul comun celor trei funcții necunoscute a fost egalată cu valoarea concentrației de electroni obținută în cadrul ciclului intern  $n^{(n+1)} = n^{(new)}$ .

La rezolvarea sistemului algebric neliniar (3.15) au fost folosite notațiile:

$\overline{p^{(ex)}}(x_1, x_2)$  soluția exactă a sistemului (3.15),  $\overline{p^{(old)}}(x_1, x_2)$  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 și  $\bar{\delta}_p(x_1, x_2)$  eroarea.

Prin urmare sunt adevărate relațiile

$$\overline{p^{(ex)}}(x_1, x_2) = \overline{p^{(in)}}(x_1, x_2) + \overline{\delta}_p(x_1, x_2), \quad \text{pentru prima iterație} \quad (4.12)$$

$$\overline{p^{(new)}}(x_1, x_2) = \overline{p^{(old)}}(x_1, x_2) + \overline{\delta}_p(x_1, x_2), \quad \text{pentru iterația curentă} \quad (4.13)$$

Liniarizarea sistemului algebric neliniar (3.15), cu aplicarea algoritmului metodei lui Newton, a presupus substituirea relației (4.13) în sistemul (3.15). Pentru separarea sistemului (3.15) de celelalte două sisteme algebrice (3.1), (3.8) în calitate de necunoscută a fost lăsată concentrația de goluri  $\overline{p^{(new)}}(x_1, x_2)$  exprimată ca în (4.13), celelalte două funcții 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 următorul sistemul algebric liniar în necunoscuta  $\overline{\delta}_p(x_1, x_2)$

$$\begin{aligned} & \left( \frac{B\left(\frac{\varphi_{i+1,j}^{(old)} - \varphi_{i,j}^{(old)}}{V_T}\right) + B\left(\frac{\varphi_{i-1,j}^{(old)} - \varphi_{i,j}^{(oldk)}}{V_T}\right)}{h_{x_1}^2} + \frac{B\left(\frac{\varphi_{i,j+1}^{(old)} - \varphi_{i,j}^{(old)}\right) + B\left(\frac{\varphi_{i,j-1}^{(old)} - \varphi_{i,j}^{(old)}\right)}{h_{x_2}^2} \right) \delta_{p,i,j} - \\ & \frac{B\left(\frac{\varphi_{i,j}^{(old)} - \varphi_{i+1,j}^{(old)}\right)}{h_{x_1}^2} \delta_{p,i+1,j} - \frac{B\left(\frac{\varphi_{i,j}^{(old)} - \varphi_{i-1,j}^{(old)}\right)}{h_{x_1}^2} \delta_{p,i-1,j} - \frac{B\left(\frac{\varphi_{i,j}^{(old)} - \varphi_{i,j+1}^{(old)}\right)}{h_{x_2}^2} \delta_{p,i,j+1} - \\ & \frac{B\left(\frac{\varphi_{i,j}^{(old)} - \varphi_{i,j-1}^{(old)}\right)}{h_{x_2}^2} \delta_{p,i,j-1} = \\ & - \left( \frac{B\left(\frac{\varphi_{i+1,j}^{(old)} - \varphi_{i,j}^{(old)}\right) + B\left(\frac{\varphi_{i-1,j}^{(old)} - \varphi_{i,j}^{(old)}\right)}{h_{x_1}^2} + \frac{B\left(\frac{\varphi_{i,j+1}^{(old)} - \varphi_{i,j}^{(old)}\right) + B\left(\frac{\varphi_{i,j-1}^{(old)} - \varphi_{i,j}^{(old)}\right)}{h_{x_2}^2} \right) \cdot p_{i,j}^{(old)} + \\ & \frac{B\left(\frac{\varphi_{i,j}^{(old)} - \varphi_{i+1,j}^{(old)}\right)}{h_{x_1}^2} p_{i+1,j}^{(old)} + \frac{B\left(\frac{\varphi_{i,j}^{(old)} - \varphi_{i-1,j}^{(old)}\right)}{h_{x_1}^2} p_{i-1,j}^{(old)} + \frac{B\left(\frac{\varphi_{i,j}^{(old)} - \varphi_{i,j+1}^{(old)}\right)}{h_{x_2}^2} p_{i,j+1}^{(old)} + \frac{B\left(\frac{\varphi_{i,j}^{(old)} - \varphi_{i,j-1}^{(old)}\right)}{h_{x_2}^2} p_{i,j-1}^{(old)} - \\ & q \left( \frac{n_{i,j}^{(old)} p_{i,j}^{(old)} - n_i^2}{\tau_p (n_{i,j}^{(old)} + n_i) + \tau_n (p_{i,j}^{(old)} + n_i)} + (n_{i,j}^{(old)} p_{i,j}^{(old)} - n_i^2) (C_n n_{i,j}^{(old)} + C_p p_{i,j}^{(old)}) \right) / (\mu_p \varphi_\tau) \end{aligned} \quad (4.14)$$

După rezolvarea sistemului algebric (4.14), prin una dintre metodele numerice iterative, în cadrul unui ciclu intern, a fost calculată valoarea  $\overline{\delta}_p(x_1, x_2)$  cu exactitate prestabilită. Această valoare  $\overline{\delta}_p(x_1, x_2)$  a fost folosită la determinarea noii aproximări pentru concentrația de goluri

$$\overline{p^{(new)}}(x_1, x_2) = \overline{p^{(old)}}(x_1, x_2) + \overline{\delta}_p(x_1, x_2). \quad (4.15)$$

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

La ieșirea din ciclul intern (4.14), (4.15) au fost calculate valorile curente ale concentrației de goluri  $p^{(new)}$  în nodurile de pe frontieră, conform relațiilor (3.16),(3.19). Valoarea curentă a concentrației de goluri  $p^{(n+1)}$  din ciclul comun celor trei funcții necunoscute a primit valoarea concentrației de goluri obținută în cadrul acestui ciclu intern  $p^{(n+1)} = p^{(new)}$ .

Ciclul de rezolvare al sistemului algebric neliniar (3.1), (3.8), (3.15) de ordinul  $((3 * NN) \times (3 * MM))$  a rulat până când a fost calculată soluția sistemului algebric  $\{\varphi^{(n+1)}, n^{(n+1)}, p^{(n+1)}\}$  cu exactitatea prestabilită.

La ieșirea din acest ciclu s-a trecut la următoarea iterație a ciclului extern în cadrul căreia valorile externe ale funcțiilor necunoscute au fost modificate  $\varphi^{(m+1)} = \varphi^{(n+1)}$ ,  $n^{(m+1)} = n^{(n+1)}$ ,  $p^{(m+1)} = p^{(n+1)}$ , cu  $(m + 1)$  iterația curentă a ciclului extern. În cadrul aceleiași iterații externe a fost mărită tensiunea aplicată la anod  $V_a$  și recalulate valorile variabilelor  $\{\varphi^{(m+1)}, \varphi_n^{(m+1)}, \varphi_p^{(m+1)}\}$ , în condițiile echilibrului termodinamic. Procesul iterativ extern a decurs până când  $V_a$  a depășit valoarea 0,2 A.

A fost stabilită complexitatea modelului numeric cu aplicarea metodelor iterative a Gradientilor Conjugăți (MGC) și cea a Gradientilor Bi Conjugăți (MGBiC), teoretic. În cazul realizării unei iterații interne cu aplicarea MGC sunt necesare o operație de înmulțire a matricei la un vector și nouă operații asupra vectorilor (de adunare, scădere, înmulțire la o constantă, împărțire la o constantă), iar la aplicarea MGBiC trei operații de înmulțire a matricei la un vector și douăzeci și două operații asupra vectorilor (de adunare, scădere, înmulțire la o constantă, împărțire la o constantă). Dacă notăm prin  $nn \times nn$  ordinul matricei sistemului  $A$  și luând în calcul că este o matrice predominant cinci diagonală numărul total de operații la o iterație a fost calculat în baza următoarelor componente  $t_0 = 5nn^2 + 15nn - 3$ , ca număr de operații scalare necesare pentru calcularea valorilor inițiale. Pentru realizarea unei iterații interne în cazul MGC  $t_1 = nn^2 + 3nn - 2$ , numărul de adunări/scăderi ale scalarilor,  $t_2 = nn^2 + 6nn + 2$ , numărul de înmulțiri/împărțiri ale scalarilor. Pentru realizarea unei iterații interne în cazul MGBiC  $t_1 = 2nn^2 + 9nn - 7$ , numărul de adunări/scăderi ale scalarilor,  $t_2 = 2nn^2 + 13nn$  numărul de înmulțiri/împărțiri ale scalarilor. Astfel, dacă  $k_0$  este numărul minim de iterații, necesar pentru determinarea soluției cu exactitatea prestabilită, atunci numărul total de operații pentru calcularea soluției sistemului (3.17), (3.18), (3.19) este  $T = (10nn^2 + 53nn - 14) * k_0 + 5nn^2 + 15nn - 3$ .

Rezultate numerice, obținute în urma experimentelor asupra algoritmului modelării numerice a proceselor neliniare în dioda semiconductoare, cu utilizarea ideii algoritmului Newton la liniarizare

a) Tabelul numărului mediu de iterații, efectuate pentru calculării soluțiilor cu exactitatea prestabilită de ordinul  $10^{-10}$ , obținut în urma măsurărilor experimentale asupra algoritmului numeric ce modelează matematic procesele neliniare în dioda semiconductoare (cazul MGC&MGBiC), implementat pe o rețea de noduri ( $16 \times 32$ ):

**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, $\varphi$	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	3

b) Suprafețele funcțiilor  $\varphi$ ,  $n$  și  $p$ , construite în baza rezultatelor experimentale obținute la rezolvarea problemei diodei semiconductoare cu utilizarea MGC&MGBiC, sunt prezentate în *Anexa 2*.

#### Concluzii la capitolul 4

Problema dispozitivelor semiconductoare este una dintre cele mai complicate în practica inginerescă. În Capitolul 4 a fost descris algoritmul numeric, care soluționează problema dispozitivului semiconductor, folosind pentru liniarizarea ecuațiilor modelului matematic (3.1), (3.8), (3.15) ideea algoritmului metodei Newton. Utilizarea metodei Newton a fost făcută în linii generale, fiind descris și realizat un singur model numeric.

Algoritmul numeric elaborat și descris în cadrul acestui capitol, cu implementarea lui prin crearea softului corespunzător, are o viteză de convergență moderată. În timpul testării modelului numeric s-a observat că la utilizarea metodei lui Newton eficiența modelului crește odată cu creșterea exactității valorii inițiale, cel mai mult timp a durat prima iterație internă. Comparând modelul descris în cadrul acestui capitol cu modelele descrise în Capitolul 2 și Capitolul 3 se poate afirma că este unul foarte eficient și cu posibilități mari de dezvoltare a lui. În consecință, utilizarea metodei Newton la realizarea modelelor numerice pentru soluționarea problemei dispozitivului semiconductor este una de perspectivă.

Afirmațiile teoretice despre utilitatea metodei Newton, în cazurile problemelor neliniare, au fost confirmate și în cazul problemei acestei cercetări, fiind nu doar neliniară dar și cu două tipuri de condiții la frontieră, ce acționează disjunct, chiar dacă a fost aplicată doar la liniarizarea ecuațiilor.

Ce ține de o viitoare cercetare, cu utilizarea metodei Newton. Este recomandat ca prima aproximare a soluției, pentru o localizarea ei, să fie obținută cu ajutorul unei metode numerice mai puțin sensibilă la aproximația inițială, dar posibil mai lentă. Timpul ar putea fi recuperat în cadrul următoarelor iterații, cu aplicarea metodei Newton. Posibil, astfel ar mai putea fi elaborați și alți algoritmi eficienți, pentru modelarea numerică a proceselor neliniare în dispozitivul semiconductor.

## 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 au fost descriși în Introducere. Softul corespunzător, poate fi folosit la modelarea reală a dispozitivelor semiconductoare.

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 Cercetatori. 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), 5<sup>th</sup> 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.

Rezultatele obținute contribuie la extinderea ariei de cercetare a problemei de modelare 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.

## BIBLIOGRAFIE

1. 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 15708659.
2. САМАРСКИЙ, А. А. *Введение в численные методы*. Москва: Наука, 1987. 272 с.
3. САМАРСКИЙ, А.А. *Теория разностных схем*. Москва: Наука, 1989. ISBN 5-02-014576-9.
4. САМАРСКИЙ А.А., НИКОЛАЕВ, Е.С. *Методы решения сеточных уравнений*. Москва: Наука, 1978. 591 с.
5. САМАРСКИЙ, А.А., ГУЛИН, А.В. *Численные методы*. Москва: Наука, 1989. 432 с. ISBN 5-02-013996-3.
6. WILSON, А.Н. *The Theory of Electronic Semi-Conductors I*. In: Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Vol. 133, No. 822 (Oct. 1, 1931) pp. 458-491. ISSN 0950-1207.
7. WILSON, А.Н. *The Theory of Electronic Semi-Conductors II*. In: Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Vol. 133, No. 822 (Nov. 3, 1931). pp. 277-287. ISSN:2053-9150.
8. BALKANSKI, M. *Handbook on Semiconductors*, North-Holland: Amsterdam, 1994. 857 p. ISBN 9780444893888.
9. ANDREI, N. *Acceleration of conjugate gradient algorithms for unconstrained optimization*. North-Holland: Elsevier - AMC, 2009. pp. 361-369. ISSN 0096-3003
10. ANDREI, N. *An adaptive conjugate gradient algorithm for large-scale unconstrained optimization*. North-Holland: Elsevier - AMC, 2016. pp. 83 – 91. ISSN:0377-0427.
11. 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.
12. ANDREI, N. *Programarea matematică avansată*. București: Ed. Tehnică, TMCA, 1999. 879 p. ISBN: 9733113921.
13. SHEWCHUK, J.R. *An Introduction to the Conjugate Gradient Method Without the Agonizing Pain*. Pittsburgh: Carnegie Mellon University, 1994. 63p. ISBN: 10017116140
14. HESTENES, M.R., STIEFEL, E. *Methods of Conjugate Gradients for Solving Linear Systems*. In: Journal of Research of the National Bureau of Standards 49 (1952), pp.409–436. ISSN: 0220-7234.
15. REID JOHN, K. *On the Method of Conjugate Gradients for the Solution of Large Sparse Systems of Linear Equations, Large Sparse Sets of Linear Equations* (London and New York) (John K. Reid, ed.), Academic Press, London and New York, 1971, pp. 231–254. ISSN: 0070-9032.
16. FLETCHER, R. *Conjugate gradient methods for indefinite systems*. Berlin: Numerical Analysis. Lecture Notes in Mathematics. Springer pp.73–89. ISSN:1617-9692.
17. VAN DER VORST, H.A. *Bi-CGSTAB: A Fast and Smoothly Converging Variant of Bi-CG for the Solution of Nonsymmetric Linear Systems*. SIAM J. Sci. Stat. Comput.: 1992. pp. 631–644. ISSN: 0091-3035.

18. SAAD, Y. *Iterative Methods for Sparse Linear Systems* (2nd ed.). SIAM. 2003. pp. 231–234. ISBN: 9780898715347.
19. VASILESKA, D., GOODNICK, S.M., KLIMECK, G. *Computational Electronics: Semiclassical and Quantum Device Modeling and Simulation*. Amazon: CRC Press, 2017. 764 p. ISBN: 9781420064834.
20. *Simulation of Semiconductor Devices and Processes*. Ed.: Selberherr, Siegfried, Stippel, Hannes, Strasser, Ernst (Springer-Verlag, Wien New York), 1993. ISBN 978-3-7091-6657-4
21. *Numerical Simulation of Submicron Semiconductor Devices*. Ed.: TOMIZAWA K., (The Artech House Materials Science Library), 1993. ISBN: 0890066205.
22. MIRZAVAND, R., ABDIPOUR, A., SCHILDERS, W.H.A., MORADI, G., MOVAHHEDI, M. *LOD-FDTD method for physical simulation of semiconductor devices*. (CASA-report; Vol. 1016). Eindhoven: Technische Universiteit Eindhoven, 2010. ISSN: 0926-4507.
23. Siegfried Selberherr *Analysis and Simulation of Semiconductor Devices Softcover*. Ed. Springer, 1984, pp.300. ISBN: 3709187540.
24. Editors: SWART, J.W., SELBERHERR, S., SUSIN, A.A., DINIZ, J.A., MORIMOTO, N. *Microelectronics technologis and devices – SBMicro 2008*. Vol.14, nr.1. USA: Electrochemical Society, 2008, 660 pp. ISSN: 19385862.
25. SCHARFETTER, D. L., GUMMEL, H. K. *Large-Signal Analysis of a Silicon Read Diode Oscillator*. IEEE Trans. Electron Devices, vol. ED-16, 1969. pp. 64–77. ISSN: 0147-5609
26. 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.
27. MOVAHHEDI, M., ABDIPOUR, A. *Efficient Numerical Methods for Simulation of High-Frequency Active Devices*. IEEE Trans. Microw. Theory and Tech., vol. 54, no. 6, June 2006. pp. 2636-2645. ISSN: 0018-9480.
28. Editors: LIMA MONTEIRO, D.W., BONNAUD, N., MORIMOTO, N. *Microelectronics technologis and devices – SBMicro 2008*. Vol.23, nr.1. USA: Electrochemical Society, 2009. 621 pp. ISSN: 19385862.
29. LIU, Q.F., CHEN, Z., YIN, W.Y. *An Arbitrary-Order LOD-FDTD Method and its stability and numerical dispersion*. IEEE Trans. Antennas Propag. 2009. pp. 2409– 2417. ISSN: 1992-2213.
30. JINN-LIANG, Liu *Scharfetter-Gummel Method*. Taiwan: DAM, NHUE, 2016.
31. ZHENG, F., CHEN, Z. *Numerical dispersion analysis of the unconditionally stable 3-D ADI-FDTD method*. IEEE Trans. Microw. Theory Tech., 2001. pp.1006–1009. ISSN: 3254-4175.
32. PECULEA, A., IANCU, B., DĂDÂRLAT, V., BUZURA, S. *Circuite analogice și numerice*. Cluj-Napoca: 2020. 91p. ISBN 978-606-737-458-2.
33. RONGHUA, Li, ZHONGYING, Chen, WEI, Wu *Generalized Difference Methods for Differential Equations: Numerical Analysis of Finite Volume Methods*. SUA: CRC Press, 2000, ISBN 9780824703301.

34. ИЛЬИН, В.П. *Методы конечных разностей и конечных объемов для эллиптических уравнений*. Новосибирск: Изд-во Института математики, 2000. 345 с. ISBN: 5-86134-087-0.
35. ИЛЬИН, В.П. *Численные методы решения задач электрофизики*. Москва: Наука, 1988. 335 с. ISBN:3.80
36. Farrell, P., Peschka, D. . *Challenges in Drift-Diffusion Semiconductor Simulations*. In: Finite Volumes for Complex Applications IX - Methods, Theoretical Aspects, 2020. pp.615-623. ISBN: 978-3-030-43650-6.
37. GUMMEL, H.K. *A self-consistent iterative scheme for one-dimensional steady state transistor calculation*. In: IEEE Transactions on Electron Devices, 1964. Vol. 11, pp.455-465. ISSN: 1557-9646.
38. ANGHEL, D.S. *Bazele electronicii analogice și digitale*. Cluj-Napoca : Presa Universitară Clujeană, 2007. 220 p. ISBN 978-973-610-554-8.
39. PITEA, A., POSTOLACHE, M. *Modelare numerică pentru ecuații diferențiale și ecuații cu derivate parțiale*. București: Ed. Fair Partners, 2007. 114p. ISBN: 978-973-8470-98-9.
40. PETRESCU, M. (coord) *Tratat de știința și ingineria materialelor metalice vol 3 - Metale. Aliaje. Materiale speciale. Materiale compozite*. București: Editura Agir, 2009. 1578p. ISBN: 9737200640.
41. LAKATOȘ, E.Șt. *Dispozitive Semiconductoare Fundamentale*. București: Ed. AGIR, 2008. 188 p. ISBN: 973-720-201-7.
42. 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.
43. LAKATOȘ, E.Șt. *Rolul fizicii în dezvoltarea microelectronicii*. București: Ed. Electrica, 2014. 212p. ISBN: 978-606-507-076-9.
44. WOLF, S. *Silicon Processing for the VLSI Era, vol. 3 – Process Integration*. California, Sunst Beach: Lattice Press, 1990. 722p. ISBN: 0961672153.
45. SZE, S.M., KWOK, K. Ng. *Physics of Semiconductor Devices*. New Jersey: John Wiley & Sons, Inc. 2006. ISBN: 9780471143239.
46. FOWLER, A.C. *Mathematical Models in the Applied Sciences*. Cambridge: Cambridge Texts in Applied Mathematics Series, Cambridge University Press, 1997. 310 p. ISBN: 0 521 46703 9.
47. SORAN, I.F., KISCH, D.O., SÎRBU, G.M. *Modelarea sistemelor de conversie a energiei*. București: Ed. ICPE, 1998. 158p. ISSN: 209585957.
48. KIREEV, P.S. *Fizica semiconductorilor [Fizica Poluprovodnikov]*, translated from the Russian by Victor SCUTARU, Bucharest: Editura Științifică și Enciclopedică, 1977. 799p.
49. Lee, J., Fornberg, B. *Some unconditionally stable time stepping methods for the 3D Maxwell*. J. Comput. Appl. Math., 2004. vol. 158., pp. 484-505. ISSN: 361-598.
50. RUSU, A. *Modelarea componentelor microelectronice active*. București: Editura Academiei Române, 1990. 200p. ISBN: 973-27-0122-6.

51. Numerical Analysis. Historical Developments in the 20th Century, editat de BREZINSKI, C., WUYTACK, L.: WATSON, G. *Approximation in normed linear spaces*. Amsterdam: Ed. ELSEVIER, 2001. pp. 41-77. ISBN: 0444506179.
52. Numerical Analysis. Historical Developments in the 20th Century, editat de Brezinski, C., WUYTACK, L.: BREZINSKI, C. *Convergence acceleration during the 20th century*. Amsterdam: Ed. ELSEVIER, 2001. pp. 113-135. ISBN 0444506179.
53. 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.
54. Numerical Analysis. Historical Developments in the 20th Century, editat de BREZINSKI, C., WUYTACK, L.: GOLUB, G.H., VAN DER VORST, H.A.. *Eigenvalue computation in the 20th century*. Amsterdam: Ed. ELSEVIER, 2001, pp. 209-241. ISBN 0444506179.
55. Numerical Analysis. Historical Developments in the 20th Century, editat de BREZINSKI, C., WUYTACK, L.: YAMAMOTO, T. *Historical Developments in convergence analysis for Newton's and Newton-like methods*. Amsterdam: Ed. ELSEVIER, 2001. pp. 241 – 265. ISBN 0444506179.
56. Numerical Analysis. Historical Developments in the 20th Century, editat de BREZINSKI, C., WUYTACK, L.: LAURIE, D.P. *Computation of Gauss-type quadrature formulas*. Amsterdam: Ed. ELSEVIER, 2001. pp. 313 – 331. ISBN: 0444506179.
57. Numerical Analysis. Historical Developments in the 20th Century, editat de BREZINSKI, C., WUYTACK, L.: BUTCHER, J.C., Van der Vorst *Numerical methods for ordinary differential equation in the 20th century*. Amsterdam: Ed. ELSEVIER, 2001. pp. 449 – 479. ISBN: 0444506179.
58. SLOTBOOM, J.W. *Computer-aided two-dimensional analysis of bipolar transistors*. IEEE Transactions on Electron Devices, Vol. 20, 1973. pp. 669-679. ISSN: 1557-9646
59. DONGARRA, J., DUFF, I., SORENSEN, D., Van der Vorst *Numerical linear algebra for high-performance computers*. Philadelphia: SIAM, 1998, 342 p. ISBN:978-0-89871-428-9
60. КАРПОВ, В.Я. *Решение уравнения Пуассона на многопроцессорной ЭВМ*. Москва: Математическое Моделирование, 1997, т. 9, №9, 22 с. ISSN: 02340879.
61. LAKATOŞ, E.Şt. *Modelarea dispozitivelor semiconductoare active*. România: Ed. Matrixrom, 2009. 84p. ISBN: 9736855694.
62. JACK, J. *Performance of Various Computers Using Standard Linear Equations Software*. In: Computer Science Department University of Tennessee Knoxville, 2001. 50 p. ISBN: 37996-1301.
63. ТИХОНОВ, А.Н., САМАРСКИЙ, А.А. *Уравнения математической физики*. Москва: МГУ, 1999, 799 с. ISBN: 5-211-04138-0
64. LEBEDEV, V.I. *Explicit difference schemes with variable time steps for solving stiff systems of equations*. Lect. Notes in Comput. Sci 1196. Numer. Analys. And Its Applic, Springer, 1997. pp.274-283. ISBN:3540625984.

65. KARAMZIN, YU., POLYAKOV, S.V., KUDRYASHOVA, T.A. *On a class of flux schemes for convection-diffusion equations*. In: Computational Mathematics and Information Technologies, vol.2, 2017. pp. 169-180. ISSN: 2587-8999.
66. FOWLER, A.C., *Mathematical Models in the Applied Sciences*, Cambridge: University Press, 1997. 402 p. ISBN: 0-521-46140-5.
67. POPA, C. *On numerical solution of arbitrary symmetric linear systems by approximate orthogonalization*. In: Mathematics and Computers in Simulation 79 (4), 2008, pp.1033-1038. ISSN: 0378-4754.
68. NICOLA, A., POPA, C., *Preconditioning by an extended matrix technique for convection-diffusion-reaction equations*. In: Revue d'Analyse Numerique et de Theorie de l'approximation, vol.37, 2008. p.33. ISSN: 1222-9024.
69. JUNCU, Gh., NICOLA, A., POPA, C., UDRESCU, T. *Nonlinear multigrid methods for solving Richards's equation in two space dimensions*. Submitted to Romanian Journal on Physics, vol.25, 2009. pp. 82-91. ISSN: 43998957.
70. MARINOSCHI, G. *Mathematical models of diffusion in nonhomogeneous porous media*. In: Electronic Journal of Differential Equations, Vol. 105, 2012. pp. 1–16. ISSN: 1072-6691.
71. 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: 978-973-27-1719-6.
72. MARINESCU, D. *On a convergent numerical method for nonlinear Boltzmann-type model*. In Topics in Applied Mathematics and Mathematical Physics (Editori: C. Grunfeld, S. Ion, G. Marinoschi), Editura Academiei Romane, 2008. ISSN: 59424327.
73. BAUTU, E., PELICAN, E. *Numerical Solution For Fredholm First Kind Integral Equations Occurring*. In: Synthesis of Electromagnetic Fields, Romanian Journal of Physics, Volume 52(3-4), 2007. pp.245-256.
74. Shahid, S. *Numerical Solution of Convection-Diffusion Integro-Differential Equations with a Weakly Singular Kernel*. In: Journal of Basic and Applied Scientific Research, vol. 3(11), 2013. 15 p. ISSN 2090-4304.
75. URSU-FISCHER, N. *Metode numerice în tehnică și programe în C. .* București: Ed.CCȘ, 2013. 454p. ISBN : 978-606-17-0306-7.
76. HADÂR, A., MARIN, C. PETRE, C., VOICU, A. *Metode numerice în inginerie*. București: Ed. Politehnica, 2005, 269 pp.
77. MARINOSCHI, G., *Well-posedness results for a fast diffusion model*, Conferinta Evolution Equations: *Direct and Inverse Problems*. Bologna, Italy, September 18-20, 2006.
78. ION, Stelian, ION, Anca Veronica, MARINESCU, Dorin *ODE Approximation of Nonlinear Diffusion Equations*. The Fifth Workshop on Mathematical Modeling of Environmental and Life Sciences Problems, Constanta, Romania, September 10-13, 2006.
79. RYSSEL H., PICHLER, P. *Simulation of Semiconductor Devices and Processes* (Springer-Verlag, Wien New York), 1995. vol. 6, 501 p. ISBN: 978-3-7091-6619-2.



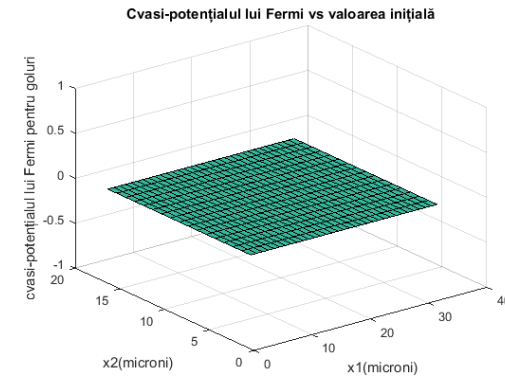
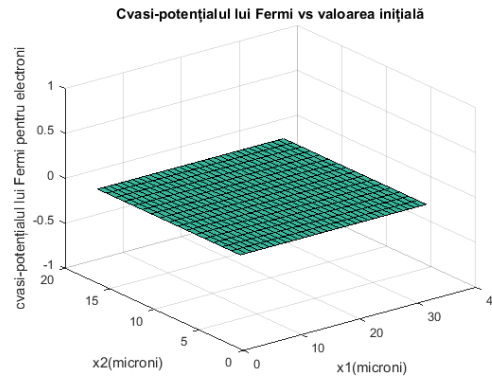
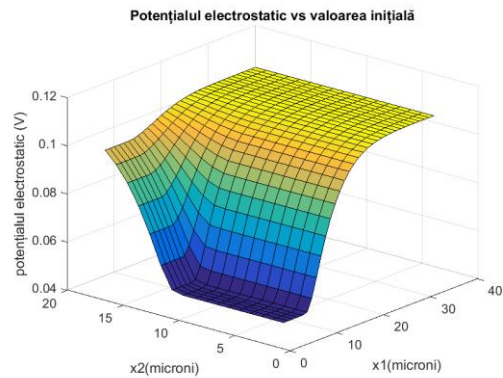
80. NICOLA, A., POPA, C., RUEDE, U. *Preconditioning by an extended matrix technique for convection-diffusion-reaction equations*. 5th Workshop on Mathematical Modelling of Environmental and Life Sciences Problems, Constanta, Romania, September 10-13, 2006.
81. SIRENKO, K., PAZYMIN, V., SIRENKO, Y. K., BAGCI, H., *An FFT-accelerated FDTD scheme with exact absorbing conditions for characterizing axially symmetric resonant structures*. In: Progress In Electromagnetics Research, Vol. 111, 2011. pp. 331-364. ISSN: 1070-4698.
82. SOFRON, E. *Dispozitive electronice cu semiconductoare*. București: Ed. Matrixrom, 2008. 88 pp. ISBN: 9789737553355.
83. LIU, Q.F., CHEN, Z., YIN, W.Y. *An Unconditionally Stable Conformal LOD-FDTD Method For Curved PEC Objects and Its Application to EMC Problems*. In: IEEE Transactions on Electromagnetic Compatibility, 2022. pp.1-10. ISSN: 0018-9375.
84. LAKATOȘ, E.Șt., PUCHIANU, D. Ct. *Modelare și simulare în spațiu*. București: Editura Printech, 2005.
85. CANȚER, S., ȘIȘIANU, T. *Fizica și tehnologiile moderne*. Chișinău: Institutul de inginerie electronică și tehnologii industriale al AȘM, UTM, 2009. vol. 7, nr.3-4.
86. *Model Engineering for Simulation*. Edited by: ZHANG, Lin, ZEIGLER, Bernard P., LAILI, Yuanjun USA: Academic Press, 2019. 443 p. ISBN: 978-0-12-813543-3.
87. ZIEGLER, P.B. *Theory of Modelling and Simulation* (3th edition). USA: University of Arizona, Tucson, 2018. 672 p. ISBN: 9780128133705.
88. SHIBAYAMA, J., MURAKI, M., YAMAUCHI, J., NAKANO, H. *Efficient implicit FDTD algorithm based on locally one-dimensional scheme*. In: Electron. Lett., Sept. 2005. vol. 41, no. 19. pp. 1046-1047. ISSN: 0013-5194.
89. LIU, Q.F., CHEN, Z., YIN, W.Y. *An Arbitrary-Order LOD-C Method and its Stability and Numerical Dispersion*. In: IEEE Trans. On Ante. and Propag., vol. 57 no. 8., 2009, pp. 2409-2417. ISBN: 1558-2221.
90. SCHARFETTER, D. L., GUMMEL, H. K. *C signal analysis of a Silicon Read diode oscillator*. IEEE Trans. Electron Devices, 1969. vol. ED-16, pp. 64–77.
91. ZHOU, A., ZHU, Z., FAN, H., QING, Q. *Three New Hybrid Conjugate Gradient Methods for Optimization*. In: Applied Mathematics, Vol.2 No.3, 2011. pp. 303-308. ISSN: 2152-7385.
92. MORTON, K. W., MAYERS, D. F. *Numerical Solution of Partial Differential Equations*. Second Edition, New York: Cambridge University Press, 2005. 293 p. ISBN: 0-521-60793-0.
93. TOMIZAWA, K. *Numerical Simulation of Submicron Semiconductor Devices*. In: Norwood, MA: Artech House, 1993. 356 p. ISBN: 0890066205.
94. PANĂ, Gh., CARP, M.C. *Tehnici de simulare. Aplicații în ingineria electrică și electronică*. Brașov: Ed.Universității Transilvania, 2011. 104 pp. ISBN: 9789735989910.
95. PINAKPANI, Nayak *1D Drift Diffusion simulator for modeling pn - junction Diode*. In: Arizona State University, 2008. pp.11-13.
96. FRENSELY, W.R. *Scharfetter-Gummel discretization scheme for Drift -Diffusion equation*. University of Texas at Dallas: 2004. pp.1-3.

97. FLETCHER, R., WATSON, G. *Conjugate gradient methods for indefinite systems. Numerical Analysis*. In: Lecture Notes in Mathematics. Springer Berlin / Heidelberg. Alistair, ed. 1976. pp. 73-89.
98. SELBERHERR, S. *Simulation of Semiconductor Devices and Processes* (Springer-Verlag, Wien New York), 1993. vol. 5, 504 p. ISBN: 978-3-7091-7372-5.
99. WILSON, A. H. *A Note on the Theory of Rectification*. In: Proceedings of the Royal Society of London. Series A, 1932. vol. 136, no. 830, pp. 487-498.
100. DOLOCAN, V. *Fizica joncțiunilor cu semiconductoare [Physics of Semiconductor Junctions]*. Bucharest: Editura Academiei Române, 1982. 319 p.
101. SHOCKLEY, W. *The Theory of P-N Junctions in Semiconductors and P-N Junction Transistors*. In: Bell System Technical Journal, 1949. vol. 28, nr. 3, pp. 435-489.
102. TANENBAUM, M., et al. *Silicon n-p-n Grown Junction Transistors*. In: Journal of Applied Physics, 1955, vol. 26, no. 9, pp. 686-692.
103. FROSCHE, C. J., DERICK, L. *Surface Protection and Selective Masking during Diffusion in Silicon*. In: Journal of the Electrochemical Society, 1957. vol. 104, no. 9, pp. 547-552. ISSN: 9557-3203.
104. GRAY, P. R., HURST, P. J., LEWIS, S. H., MEYER, R. G. *Analysis and Design of Analog Integrated Circuits (5th Edition)*, In: John Wiley & Sons, New York, 2009. 896 p. ISBN: 0470245999.
105. LAKATOȘ, E.Șt. *60 Years from the Invention of the Integrated Circuit*. România: Electrotehnica, Electrica, Automatica (EEA), vol.66, nr.3, 2018. pp.72-80. ISSN: 1582-5175.
106. 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.
107. 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.
108. SHOJI, I., MASAOKI, S. *Formulation of a Preconditioned Algorithm for the Conjugate Gradient Squared Method in Accordance with Its Logical Structure*. In: Applied Mathematics, Vol.6 No.8, 2015. pp. 1389-1406. ISSN: 2152-7385.
109. FENG, Y. K., HINTZ, A. *Simulation of sub-micrometer GaAs MESFET's using a full dynamic transport model*. In: IEEE Trans. Electron Devices, vol. 35, pp.1419-1431, 1988. ISSN: 0018-9383.
110. ANGHEL, V., PASTRAMĂ, Ș. D., MAREȘ, C. *Metode și programe pentru calculul structurilor. Noțiuni teoretice și aplicații în MatLab*. Ed. UP București, 1998.
111. Dugaev Vitalii K , Litvinov Vladimir I *Modern Semiconductor Physics and Device Applications*. . In: USA, CRC Press, 2022. 397p. ISBN 9780367250829
112. Abdelwahab, KHARAB, Ronald B. GUENTHER *An introduction to numerical methods: A MATLAB Approach*. 2012. 576 p. ISBN: 978-1-4398-6900-0.
113. Nedjalkov, M., DIMOV, I., SELBERHERR, S. *Concepts of Device Modeling*. In: Stochastic Approaches to Electron Transport in Micro- and Nanostructures. Modeling and Simulation in Science, Engineering and Technology, 2021. 12 pp. ISBN 978-3-030-67916-3.

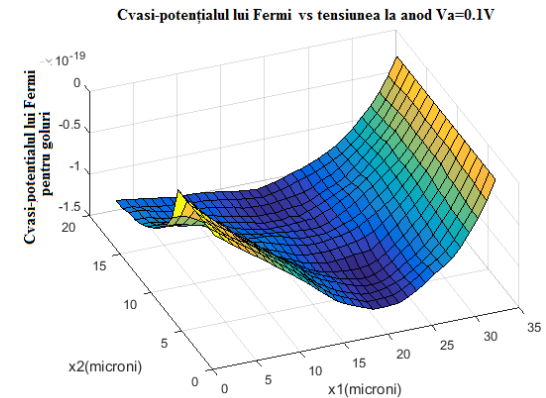
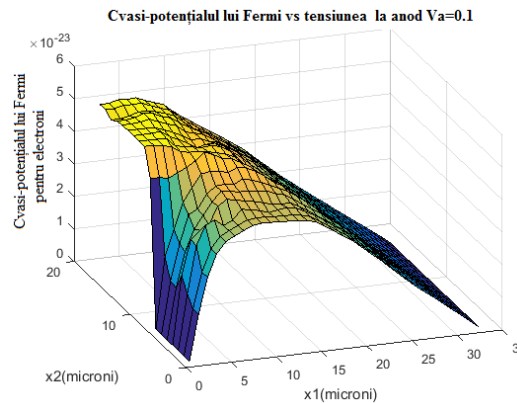
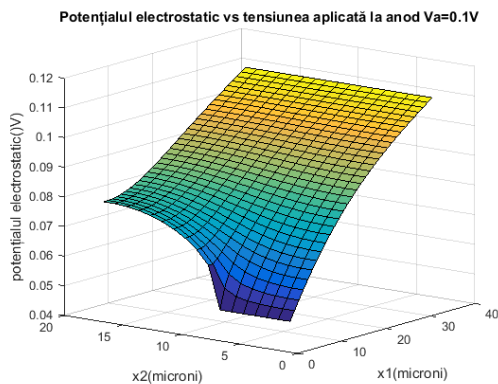
## ANEXE

**Anexa 1** Soluțiile problemei de modelare matematică a proceselor neliniare în dioda semiconductoră confecționată din siliciu, formulată prin variabilele potențialului electrostatic și a cvasi-potențialelor lui Fermi pentru electroni și goluri.

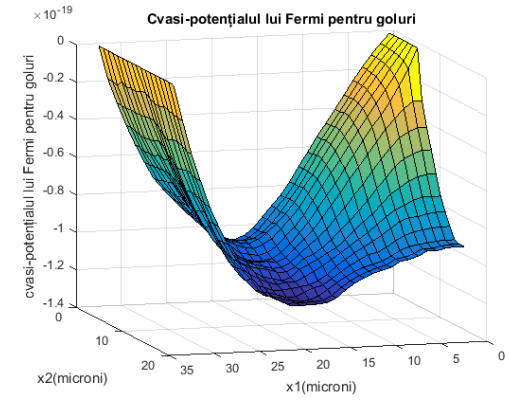
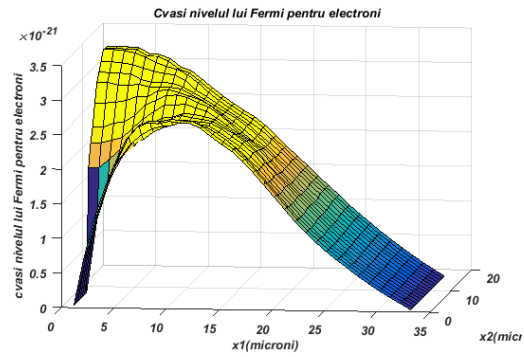
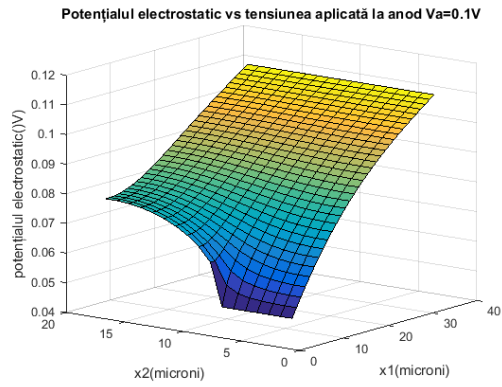
A1.1 *Suprafețele potențialului electrostatic ( $\varphi^{(0)}$ ), a cvasi-potențialelor Fermi pentru electroni ( $\varphi_n^{(0)}$ ) și goluri ( $\varphi_p^{(0)}$ ) cu valori inițiale, calculate pentru tensiunea aplicată la anod  $U = 0\text{ V}$  conform formulelor (2.10).*



A1.2 *Suprafețele potențialului electrostatic ( $\varphi$ ), a cvasi-potențialelor Fermi pentru electroni ( $\varphi_n$ ) și goluri ( $\varphi_p$ ), calculate pentru tensiunea aplicată din exterior la anod  $U = 0.1\text{ V}$ .*

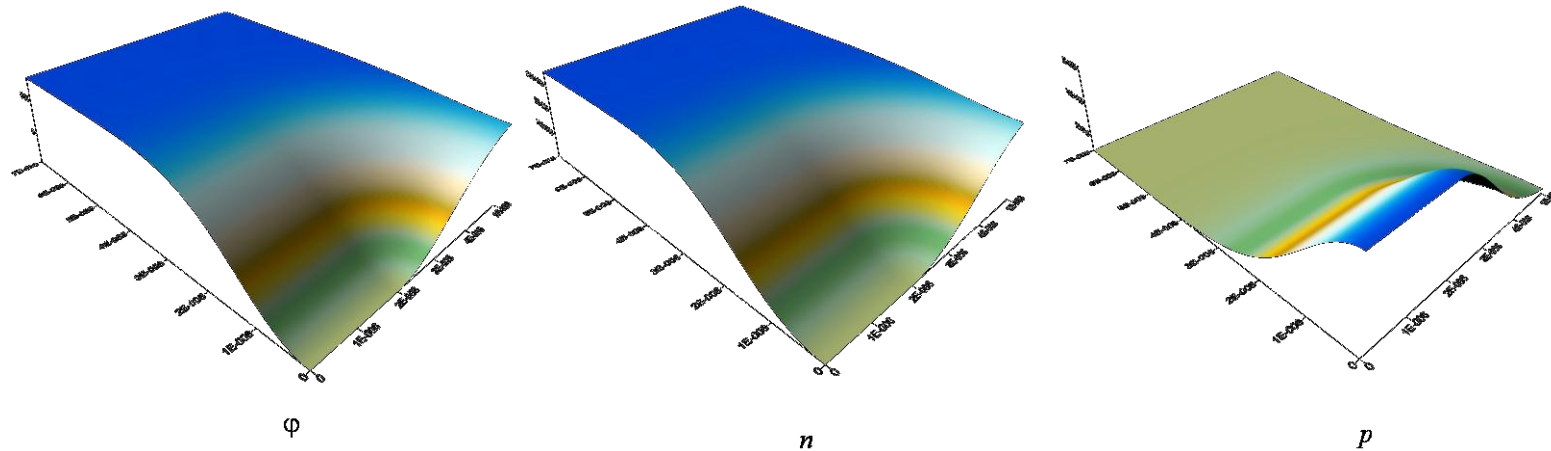


A1.3 *Suprafețele potențialului electrostatic ( $\phi$ ), a cvasi-potențialelor Fermi pentru electroni ( $\phi_n$ ) și goluri ( $\phi_p$ ), calculate pentru tensiunea aplicată din exterior la anod  $U = 0.2 V$*

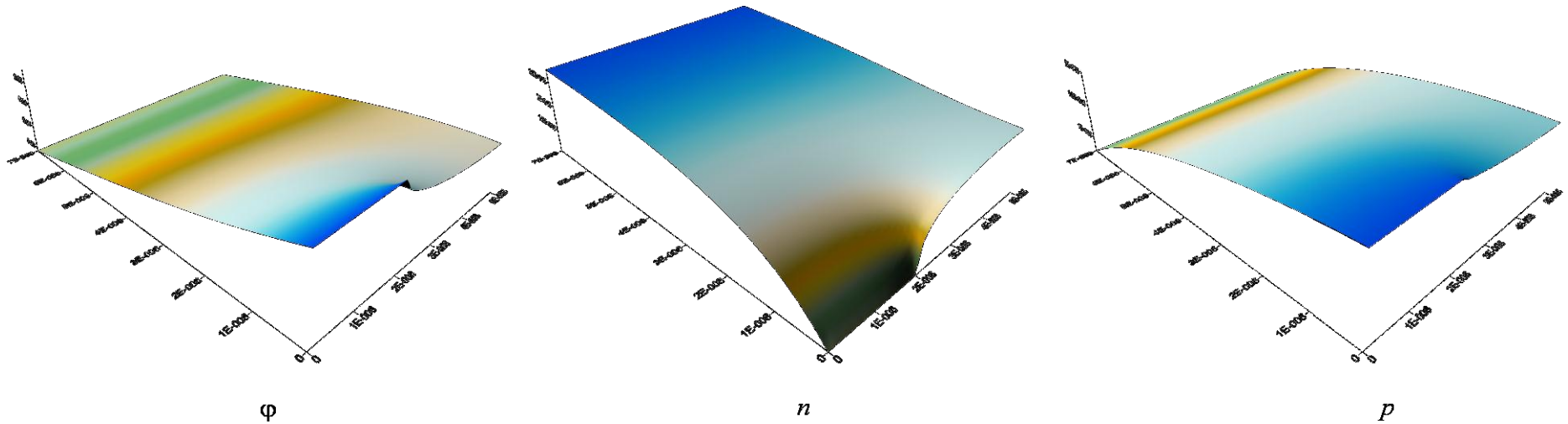


**ANEXA 2** Soluțiile problemei de modelare matematică a proceselor neliniare în dioda semiconductoră confecționată din siliciu, formulată prin variabilele potențialului electrostatic și a concentrațiilor pentru electroni și goluri.

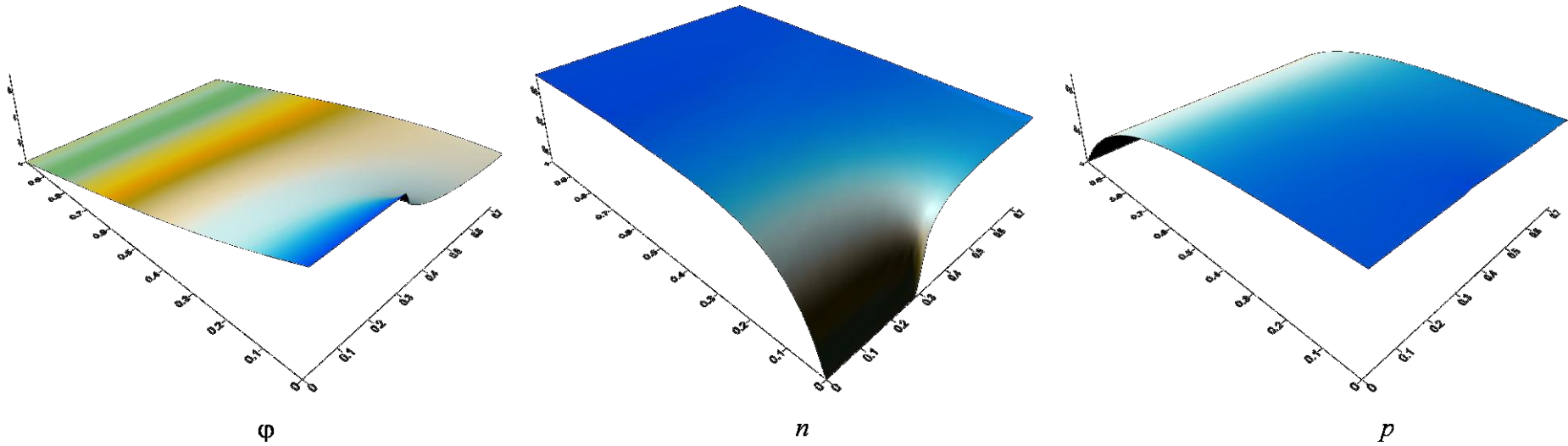
*A2.1 Suprafețele potențialului electrostatic ( $\varphi^{(0)}$ ), a concentrațiilor de electroni ( $n^{(0)}$ ) și goluri ( $p^{(0)}$ ) cu valori inițiale, calculate pentru tensiunea aplicată la anod din exterior  $U = 0 V$ .*



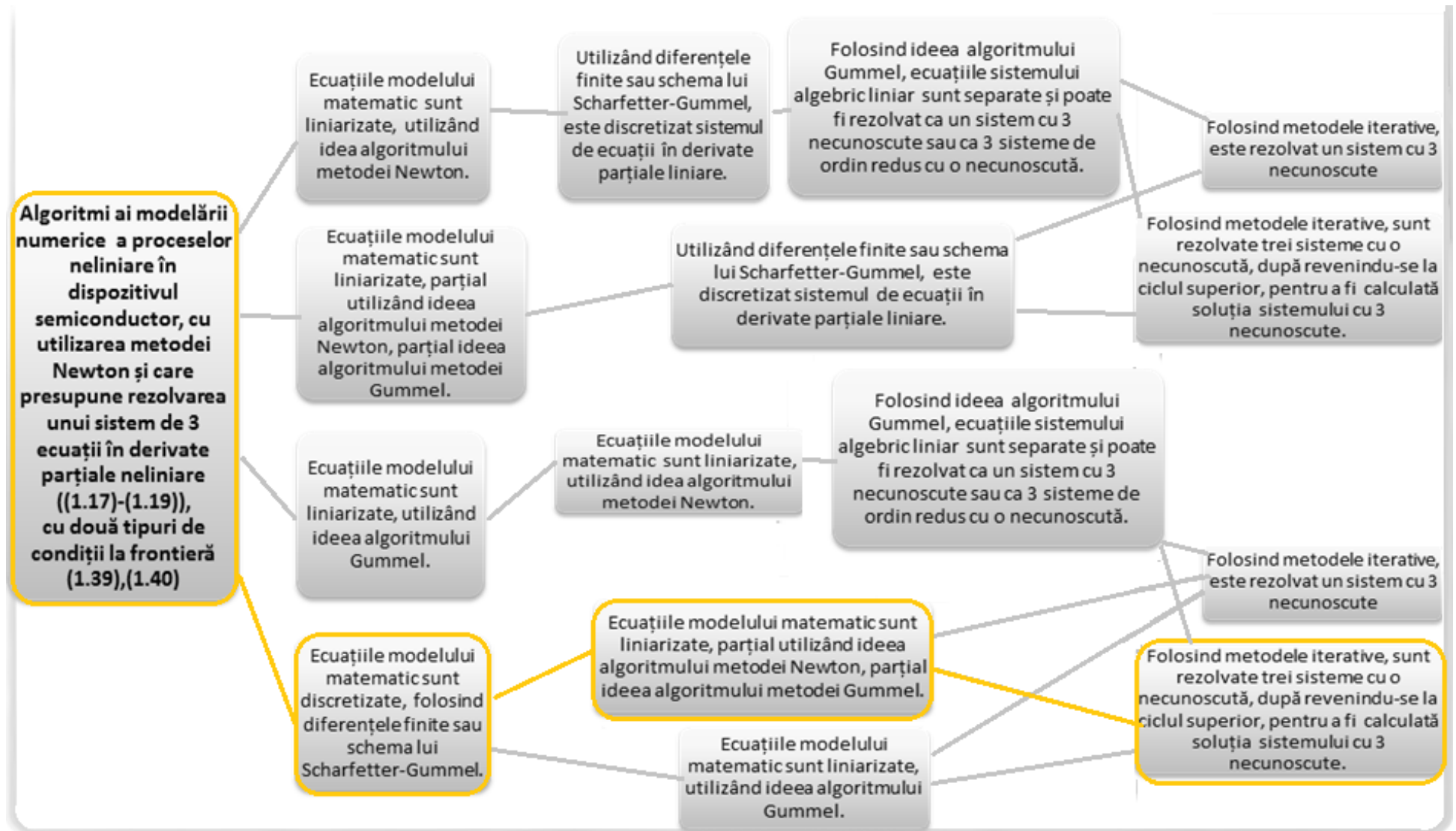
*A2.2 Suprafețele potențialului electrostatic ( $\varphi$ ), a concentrațiilor de electroni ( $n$ ) și goluri ( $p$ ), calculate pentru tensiunea aplicată la anod din exterior  $U = 0.1 V$ .*



A2.3 *Suprafețele potențialului electrostatic ( $\varphi$ ), a concentrațiilor de electroni ( $n$ ) și goluri ( $p$ ), calculate pentru tensiunea aplicată la anod din exterior  $U = 0.2 V$*



**ANEXA 3** Schema propusă pentru elaborarea algoritmilor numerici, ce modelează matematic procesele neliniare în dispozitivele semiconductoare, cu aplicarea metodei Newton. Algoritmul evidențiat cu culoarea oranj a fost realizat în cadrul cercetării.

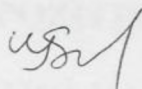


## DECLARAȚIA PRIVIND ASUMAREA RĂSPUNDERII

Subsemnata, declar pe răspunderea personală că materialele prezentate în teza de doctor sunt rezultatul propriilor cercetări și realizări științifice. Conștientizez că în caz contrar urmează să suport consecințele în conformitate cu legislația în vigoare.

Sprincean Galina

Semnătura:



Data:

11.04.2022



## CV – ul AUTORULUI

**Numele și Prenume:** Sprincean Galina



**Data nașterii:** 11.09.1975

**Locul nașterii:** Republica Moldova  
raionul Criuleni, satul Cruglic

**Cetățenia:** Republicii Moldova și a României

### **Studii:**

2013 – 2021: **studii de doctorat**, Universitatea de Stat din Moldova,  
Specialitatea 112.3 – Cibernetică Matematică și Cercetări Operaționale

1998 – 2001: **studii superioare de masterat**, Universitatea de Stat din Moldova,  
Facultatea Matematică și Informatică, calificarea master în matematică.

1993 – 1998: **studii superioare de licență**, Universitatea de Stat din Moldova,  
Facultatea Matematică și Informatică, specialitatea Analiză Numerică,  
calificarea: licențiat în matematică.

### **Domenii de interes științific:**

Modelarea matematică, analiză numerică.

### **Activitatea profesională:**

2005 – prezent: lector universitar, departamentul Sociologie și Asistență Socială,  
Facultatea Psihologie și Științe ale Educației, Sociologie și Asistență  
Socială, Universitatea de Stat din Moldova

2003 – 2005: profesor de informatică, Liceul Teoretic ”Spiru Haret”, Chișinău

2001 – 2003: profesor de informatică, Liceul Teoretic ”Matei Basarab”, Chișinău

1998 – 2001: profesor de informatică, Liceul Teoretic ”Gheorghe Meniuc”, Chișinău

### **Lucrări științifice și științifico – metodice publicate:**

Articole științifice - 8; Teze ale comunicărilor științifice - 13

### **Cunoașterea limbilor:**

Română (maternă) – bine; Rusă – bine; Engleză – mediu.

### **Date de contact:**

Chișinău, str. A. Mateevici 60, bir. 422/3; Tel. 068465650; e-mail: sgalina11@rambler.ru