

RESOLUCIÓN DE LAS ECUACIONES DE DERIVA-DIFUSIÓN MEDIANTE UN MÉTODO DE DIFUSIÓN ARTIFICIAL. APLICACIÓN A DISPOSITIVOS SEMICONDUCTORES

ULTANO KINDELÁN
y
SANTIAGO DE VICENTE

*Departamento de Matemática Aplicada y Métodos Informáticos,
Universidad Politécnica de Madrid, E.T.S.I. de Minas,
Ríos Rosas 21, 28003 Madrid*

RESUMEN

En este artículo se propone un nuevo método de difusión artificial para la resolución del sistema de ecuaciones en derivadas parciales que representa el comportamiento de un dispositivo semiconductor en estado estacionario según el modelo clásico de deriva difusión. El método de difusión artificial consiste en añadir a dos de las ecuaciones del sistema términos difusivos provenientes de la discretización del problema transitorio a lo largo de las curvas características. Tras formular el sistema con estos nuevos términos, se compara su estabilidad con la del sistema inicial, para estudiar en qué situaciones es rentable aplicar el método. A continuación se aproxima numéricamente el sistema modificado, con el objetivo de obtener resultados que contrasten la comparación teórica anterior.

SUMMARY

This paper suggests a new artificial diffusion method for solving the drift-diffusion system of partial differential equations that describes, in the static case, potential distribution and carrier concentrations in arbitrary semiconductor devices. The artificial diffusion method consists of adding two diffusive terms, resulting from the time discretisation of the transient problem along the characteristic curves in two of the system equations. After that, the study compares the stability of the two systems in order to know under which circumstances the use of the new method produces benefits.

Recibido: Octubre 1993

INTRODUCCIÓN

El sistema de ecuaciones que representa el semiconductor en estado estacionario según el modelo de convección-difusión es de la forma:

$$\begin{aligned} \kappa_i \Delta u_i + \theta_i \operatorname{div}(u_i \overline{\operatorname{grad} u_1}) &= S_i(u_2, u_3) \\ (i = 1, 2, 3) \end{aligned} \quad (1)$$

Este sistema es un sistema no lineal e hiperbólico. Al contrario de lo que sucede con los problemas elípticos y parabólicos, la aplicación del método de elementos finitos a problemas hiperbólicos conduce a esquemas numéricos que habitualmente no proporcionan resultados razonables. Este problema se pone especialmente de manifiesto cuando la solución exacta presenta variaciones bruscas, por ejemplo en el caso de un salto debido a una discontinuidad. En este caso, la solución por elementos finitos presentará, generalmente, oscilaciones aleatorias de gran amplitud, incluso lejos del salto, y por lo tanto la solución así obtenida no se encontrará cerca de la real en casi ningún punto del dominio aproximado. Solamente desde hace poco tiempo ha sido posible superar estas dificultades y construir métodos de elementos finitos modificados no estándar que al ser aplicados a problemas hiperbólicos presentan propiedades de convergencia satisfactorias. Como ejemplo se podrían citar los métodos de Galerkin discontinuos, métodos de difusión artificial clásicos y métodos de difusión a lo largo de las líneas de corriente (streamline diffusion)².

En los métodos de Galerkin estándar se obtiene una solución inestable cuando la solución exacta presenta variaciones bruscas y $\kappa_i < h$, siendo h el diámetro de la malla. Para solventar este inconveniente los métodos de difusión artificial clásicos añaden a la ecuación (1) el término de difusión

$$-\delta_i \Delta u_i, \text{ donde } \delta_i = h - \theta_i$$

Este método produce soluciones estables pero tiene el inconveniente de introducir una cantidad de difusión extra bastante considerable. Más concretamente, este método introduce un término difusivo $-h \partial_{\eta\eta} u$ que actúa en la dirección η perpendicular a las líneas de corriente, y por lo tanto un salto u onda de choque que atravesase una línea de corriente será excesivamente suavizado por la aproximación.

En el presente trabajo se pretende resolver el inconveniente anterior añadiendo dos términos difusivos que provienen de la discretización del problema transitorio a lo largo de las curvas características, en consecuencia dichos términos no son "totalmente artificiales", y no van a desviar el comportamiento del modelo del comportamiento real del dispositivo semiconductor, como lo hace el término difusivo del método de difusión artificial clásico. El objetivo principal del artículo es estudiar la influencia que tienen los nuevos términos difusivos en la elipticidad de las ecuaciones con términos convectivos.

La validez del método de difusión artificial propuesto se ha contrastado mediante la resolución de un problema test.

ECUACIONES DE UN DISPOSITIVO SEMICONDUCTOR

Las tres ecuaciones que constituyen el sistema de ecuaciones en derivadas parciales (1) son (ver [3]):

$$\varepsilon \Delta \Psi = q(n - p - C) \quad (2)$$

$$-d_p \Delta p - \mu_p \operatorname{div}(p \overline{\operatorname{grad}} \Psi) = 0 \quad (3)$$

$$-d_n \Delta n + \mu_n \operatorname{div}(n \overline{\operatorname{grad}} \Psi) = 0 \quad (4)$$

donde:

u_1	=	Ψ, Ψ	=	Potencial eléctrico.
u_2	=	p, p	=	Concentración de huecos.
u_3	=	n, n	=	Concentración de electrones
κ_1	=	ε, ε	=	Permitividad eléctrica del medio.
κ_2	=	$-d_p, d_p$	=	Coefficiente de difusión para huecos.
κ_3	=	$-d_n, d_n$	=	Coefficiente de difusión para electrones.
θ_1	=	0		
θ_2	=	$-\mu_p, \mu_p$	=	Movilidad de los huecos.
θ_3	=	μ_n, μ_n	=	Movilidad de los electrones.
$S_1(u_2, u_3)$	=	$q(n - p - C)$,	q	= Carga del electrón, C = Concentración de impurezas.
$S_2(u_2, u_3)$	=	$S_3(u_2, u_3)$	=	0 (El balance generación - recombinación de pares electrón/hueco se supone nulo.)

A las ecuaciones (2) a (4) habrá que añadirles las condiciones de contorno adecuadas para obtener un problema matemáticamente "bien planteado" (ver [3]):

$$\begin{aligned} \Psi &= \Psi_0, & p &= p_0, & n &= n_0 & \text{en } \Gamma_0 \\ \partial_\nu \Psi &= d_p \partial_\nu p + \mu_p p \partial_\nu \Psi = d_n \partial_\nu n - \mu_n n \partial_\nu \Psi = 0 & & & & & \text{en } \Gamma_1 \end{aligned}$$

Siendo:

Γ_0 = Frontera tipo Dirichlet (Contactos óhmicos)

Γ_1 = Frontera tipo Neumann (Fronteras artificiales)

$$p_0 = \frac{1}{2} \left(-C + \sqrt{C^2 + 4n_i^2} \right) |_0 \quad (5)$$

$$n_0 = \frac{1}{2} \left(C + \sqrt{C^2 + 4n_i^2} \right) |_0 \quad (6)$$

$$\Psi_0 = \Psi_{\text{nat}} + \Psi_{\text{apl}} \quad (7)$$

$$\Psi_{\text{nat}} = U_T \log \left(\frac{C + \sqrt{C^2 + 4n_i^2}}{2n_i} \right) \quad (8)$$

n_i = Concentración intrínseca de barrera.

- Ψ_{nat} = Potencial natural debido a la distribución de cargas en el contacto óhmico.
 Ψ_{apl} = Potencial aplicado externamente.
 ν = Normal unitaria exterior en la frontera.

Escalamiento de las ecuaciones

En el sistema formado por las ecuaciones (2), (3) y (4), los valores que pueden tomar las incógnitas presentan rangos de variación muy diferentes. Conviene, en consecuencia, reescalar dichas ecuaciones en función de un parámetro físico, denominado *longitud de Debye*, y que no es más que la escala característica en la que se producen todos los fenómenos interesantes en el dispositivo semiconductor, tales como altos campos eléctricos, altas velocidades de arrastre de portadores, altos valores de la generación y/o recombinación de pares electrón-hueco, etc. En adelante se designará a la *longitud de Debye* por $L_d = \lambda^{\frac{1}{2}}$, donde el parámetro λ viene dado por:

$$\lambda = \frac{\varepsilon U_T}{q C_0} = \frac{k \varepsilon T}{q^2 C_0} \quad (9)$$

siendo:

$C_0 = \text{Sup}|C(x)| \quad \forall x \in \Omega$, máxima concentración de dopado de impurezas en el semiconductor.

k = Constante de Boltzmann.

T = Temperatura absoluta en grados Kelvin.

Para escribir las ecuaciones físicas en función del parámetro λ dado en (9), se adimensionalizan las concentraciones de portadores, de dopado y de barrera, definiendo las concentraciones adimensionales:

$$v = \frac{p}{C_0}, \quad w = \frac{n}{C_0}, \quad \chi = \frac{C}{C_0}, \quad \xi = \frac{n_i}{C_0} \quad (10)$$

de manera que lo único que queda por reescalar en las ecuaciones originales es el potencial eléctrico. Para este último se ha escogido un escalamiento "tipo convección-difusión", consistente en multiplicar el potencial por el cuadrado de la longitud de Debye y dividirlo por el potencial térmico:

$$u = \frac{\lambda}{U_T} \Psi \quad (11)$$

con el que el nuevo sistema de ecuaciones puede escribirse:

$$\begin{cases} -\Delta u = \chi + v - w \\ -\lambda \Delta v - \text{div}(v \overline{\text{grad}} u) = 0 \\ -\lambda \Delta w + \text{div}(w \overline{\text{grad}} u) = 0 \end{cases} \quad \text{en } \Omega \quad (12)$$

$$u = u_0, \quad v = v_0, \quad w = w_0 \quad \text{en } \Gamma_0 \quad (13)$$

$$\partial_\nu u = \lambda \partial_\nu v + v \partial_\nu u = \lambda \partial_\nu w - w \partial_\nu u = 0 \quad \text{en } \Gamma_1 \quad (14)$$

Las condiciones de contorno en Dirichlet en (13) se escriben:

$$\left\{ \begin{array}{l} u_0 = u_{\text{apl}} + \lambda \log \left(\frac{\chi + \sqrt{\chi^2 + 4\xi^2}}{2\xi} \right) \\ v_0 = \frac{1}{2}(-\chi + \sqrt{\chi^2 + 4\xi^2}) \\ w_0 = \frac{1}{2}(\chi + \sqrt{\chi^2 + 4\xi^2}) \end{array} \right\} \quad (15)$$

UN MÉTODO DE DIFUSIÓN ARTIFICIAL PARA RESOLVER LAS ECUACIONES DEL DISPOSITIVO SEMICONDUCTOR

Obtención de los términos de difusión artificial

Para aumentar la elipticidad del sistema se introducen términos de difusión artificial en las dos ecuaciones con términos convectivos. Los términos de difusión artificial se obtienen a partir de la aproximación del problema evolutivo. Esta aproximación se realiza mediante un método de características combinado con un método de Euler implícito y un desarrollo de Taylor de tercer orden a lo largo de las curvas características (método de Taylor-Galerkin). Haciendo tender el tiempo a infinito se obtiene el sistema aproximado modificado que representa el problema estacionario.

Se partirá del sistema de ecuaciones escalado que rige el comportamiento transitorio del dispositivo semiconductor:

$$-\Delta u = \chi + v - w \quad (16)$$

$$\partial_t v - d_p \left[\Delta v + \frac{1}{\lambda} \operatorname{div}(v \overline{\operatorname{grad} u}) \right] = 0 \quad (17)$$

$$\partial_t w - d_n \left[\Delta w - \frac{1}{\lambda} \operatorname{div}(w \overline{\operatorname{grad} u}) \right] = 0 \quad (18)$$

la discretización mediante el método de Euler implícito de las ecuaciones (16), (17) y (18) a lo largo de las curvas características asociadas a las ecuaciones (17) y (18) viene dada, para $n = 0, 1, 2, \dots$, por la resolución del siguiente problema en cada paso de tiempo:

Dados u^n, v^n, w^n en $\Omega \cup \partial\Omega$, hallar $u^{n+1}, v^{n+1}, w^{n+1}$ solución de:

$$-\Delta u^{n+1}(\bar{x}^{n+1}) = \chi(\bar{x}^{n+1}) + v(\bar{x}^{n+1}) - w(\bar{x}^{n+1}) \quad (19)$$

$$-\lambda_p \Delta v^{n+1}(\bar{x}^{n+1}) + v^{n+1}(\bar{x}^{n+1}) + F(v^{n+1}(\bar{x}^{n+1})) = v^n(\bar{x}_v^n) \quad (20)$$

$$-\lambda_n \Delta w^{n+1}(\bar{x}^{n+1}) + w^{n+1}(\bar{x}^{n+1}) + G(w^{n+1}(\bar{x}^{n+1})) = w^n(\bar{x}_w^n) \quad (21)$$

en todo punto de Ω , verificando, además, las condiciones de contorno (13) y (14) en $\partial\Omega$, y siendo:

$$\begin{aligned} t^n &= n \Delta t, & v^n(\bar{x}^n) &= v(\bar{x}^n, t^n), & w^n(\bar{x}^n) &= w(\bar{x}^n, t^n) \\ \delta_p &= \frac{\Delta t d_p}{\lambda}, & \delta_n &= \frac{\Delta t d_n}{\lambda}, & \lambda_p &= \lambda \delta_p, & \lambda_n &= \lambda \delta_n \end{aligned} \quad (22)$$

$$\bar{x}_v^n = \bar{x}_v(t^n) = \bar{x}_v(t^{n+1} - \Delta t), \quad \text{solución de la curva característica asociada a (17) en } t = t^n \quad (23)$$

$$\bar{x}_w^n = \bar{x}_w(t^n) = \bar{x}_w(t^{n+1} - \Delta t), \quad \text{solución de la curva característica asociada a (18) en } t = t^n \quad (24)$$

$$F(v) = -\delta_p v \operatorname{div} \bar{E} \quad (25)$$

$$G(w) = \delta_n w \operatorname{div} \bar{E}, \quad (\bar{E} = \overline{\operatorname{grad} u}) \quad (26)$$

En [1] por un lado y en [6] por otro, se demuestra que, al menos para problemas lineales, este método es de orden $O(h + \Delta t + h^2/\Delta t)$ para la norma L^2 y teóricamente incondicionalmente estable para una aproximación variacional con elementos finitos de Lagrange P_1 ó Q_1 del problema en cada paso de tiempo.

Para evitar la búsqueda de la posición de las partículas en el tiempo de paso previo, se sigue una técnica de evaluación de $v^n(\bar{x}_v^n)$ y de $w^n(\bar{x}_w^n)$ en (20) y (21), en función únicamente del punto \bar{x}^{n+1} mediante un desarrollo de Taylor de tercer orden, tal como se explica en [4], [9] y [10]. Esta aproximación se realiza en dos etapas:

i) Aproximación de \bar{x}^n en función de \bar{x}^{n+1}

ii) Aproximación de $v^n(\bar{x}_v^n)$ y de $w^n(\bar{x}_w^n)$ en función de $v^n(\bar{x}_v^{n+1})$ y de $w^n(\bar{x}_w^{n+1})$

De este modo, los términos que aparecen en las ecuaciones (19), (20) y (21) quedan aproximados en un punto común $\bar{x}_v^{n+1}(\bar{x}_w^{n+1})$ de Ω , y por lo tanto, el problema a resolver en cada paso de tiempo, para $n = 0, 1, 2, \dots$ queda de la forma siguiente:

Dados u^n , v^n y w^n en $\Omega U \partial \Omega$, hallar u^{n+1} , v^{n+1} y w^{n+1} solución de:

$$-\Delta u^{n+1} = \chi + v^{n+1} - w^{n+1} \quad (27)$$

$$-\lambda_p \Delta v^{n+1} + v^{n+1} + F(v^{n+1}, w^{n+1}) - \delta_p \bar{E}^{n+1} \overline{\operatorname{grad}} v^{n+1} - \frac{1}{2} \delta_p^2 \sum_{i,j=1}^2 E_i^{n+1} E_j^{n+1} \partial_{ij}^2 v^{n+1} - \frac{1}{2} \delta_p^2 \sum_{i=1}^2 \bar{E}^{n+1} \overline{\operatorname{grad}} E_i^{n+1} \partial_i v^{n+1} = v^n \quad (28)$$

$$-\lambda_n \Delta w^{n+1} + w^{n+1} + G(v^{n+1}, w^{n+1}) + \delta_n \bar{E}^{n+1} \overline{\operatorname{grad}} w^{n+1} - \frac{1}{2} \delta_n^2 \sum_{i,j=1}^2 E_i^{n+1} E_j^{n+1} \partial_{ij}^2 w^{n+1} - \frac{1}{2} \delta_n^2 \sum_{i=1}^2 \bar{E}^{n+1} \overline{\operatorname{grad}} E_i^{n+1} \partial_i w^{n+1} = w^n \quad (29)$$

en todo punto de Ω , verificando, además, las condiciones de contorno (13) y (14) en $\partial \Omega$, donde se ha adoptado la notación dada en (22), (23), (24), (25) y (26).

Notas:

- i) En las ecuaciones (28) y (29) los últimos términos son términos de difusión artificial en la dirección de las curvas características, es decir, en la dirección del campo eléctrico escalado \bar{E} .
- ii) Se ha escogido una versión totalmente implícita del método, debido a que la versión semiexplícita necesita para su estabilidad la utilización de pasos de tiempo muy pequeños ($\Delta t = 10^{-5}$ sg.).

Ecuaciones resultantes con términos de difusión artificial

Considerando el caso límite del problema transitorio discretizado cuando t tiende a infinito, se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones:

$$-\Delta u = \chi + v - w \quad (30)$$

$$-\lambda \Delta v - \operatorname{div}(v \bar{E}) - \frac{1}{2} \delta_p E_i E_j \partial_{ij}^2 v - \frac{1}{2} \delta_p \bar{E} \overline{\operatorname{grad} E_i} \partial_i v = 0 \quad (31)$$

$$-\lambda \Delta w + \operatorname{div}(w \bar{E}) - \frac{1}{2} \delta_n E_i E_j \partial_{ij}^2 w - \frac{1}{2} \delta_n \bar{E} \overline{\operatorname{grad} E_i} \partial_i w = 0 \quad (32)$$

En las ecuaciones (31) y (32) aparecen dos nuevos términos (denominados de difusión artificial) que, en principio, deben contrarrestar el efecto convectivo y por lo tanto aumentar la elipticidad del problema. Ambos términos están afectados por el parámetro δ de difusión artificial, que es

$$\delta_p = \frac{\Delta t d_p}{\lambda}$$

en el caso de la ecuación (31), y

$$\delta_n = \frac{\Delta t d_n}{\lambda}$$

en el caso de la ecuación (32).

Parece claro que para valores muy pequeños de δ la ganancia en elipticidad puede ser despreciable y sin embargo para valores de δ muy grandes se consigue un problema más estable pero que converge hacia una solución distinta a la inicial.

En el análisis de la elipticidad que se realiza en el siguiente apartado se llega a una acotación de los valores de δ para los cuales efectivamente se produce una ganancia en elipticidad con respecto al problema inicial.

Análisis comparativo del método de difusión artificial propuesto

Con el objeto de comparar el problema modificado con el problema inicial, se realiza un estudio de la elipticidad de las ecuaciones con términos convectivos modificados y sin modificar.

A partir del estudio de la elipticidad de las ecuaciones (31) y (32) se obtienen los valores que debe tomar el parámetro δ para que la elipticidad de dichas ecuaciones sea mayor que la de las ecuaciones segunda y tercera del sistema (12)

Multiplicando cada una de las ecuaciones (31) y (32) por la función test

$$\varphi \in \phi = \{\varphi \in H^1(\Omega), \varphi|_{\Gamma_d} = 0\}$$

se obtiene la siguiente formulación variacional:

$$\begin{array}{ll} \text{Hallar } v \in V = \{v \in H^1(\Omega), v|_{\Gamma_d} = \bar{v}\} & \text{tal que } a_2(v, \varphi) = 0 \\ \text{Hallar } w \in W = \{w \in H^1(\Omega), w|_{\Gamma_d} = \bar{w}\} & \text{tal que } a_3(w, \varphi) = 0 \end{array}$$

donde:

$$a_2(v, \varphi) = \lambda \int_{\Omega} \overline{\text{grad}v} \overline{\text{grad}\varphi} d\Omega - \int_{\Omega} \text{div}(\overline{E}v)\varphi d\Omega + \\ + \frac{1}{2}\delta_p \int_{\Omega} \partial_i v \partial_j (E_i E_j \varphi) d\Omega - \frac{1}{2}\delta_p \int_{\Omega} \varphi \overline{E} \overline{\text{grad}E_i} \partial_i v d\Omega \quad (33)$$

$$a_3(w, \varphi) = \lambda \int_{\Omega} \overline{\text{grad}w} \overline{\text{grad}\varphi} d\Omega + \int_{\Omega} \text{div}(\overline{E}w)\varphi d\Omega + \\ + \frac{1}{2}\delta_n \int_{\Omega} \partial_i w \partial_j (E_i E_j \varphi) d\Omega - \frac{1}{2}\delta_n \int_{\Omega} \varphi \overline{E} \overline{\text{grad}E_i} \partial_i w d\Omega \quad (34)$$

Para que las ecuaciones (31) y (32) sean elípticas deben existir dos constantes α_2 y α_3 tales que:

$$a_2(v, v) \geq \alpha_2 |v|_1^2, \quad a_3(w, w) \geq \alpha_3 |w|_1^2$$

con α_2 y $\alpha_3 > 0$.

Por lo que respecta a la primera de ellas:

$$a_2(v, v) = \lambda \int_{\Omega} |\overline{\text{grad}v}|^2 d\Omega - \int_{\Omega} \text{div}(\overline{E}v)v d\Omega + \frac{1}{2}\delta_p \int_{\Omega} \partial_i v \partial_j (E_i E_j v) d\Omega \\ - \frac{1}{2}\delta_p \int_{\Omega} v \overline{E} \overline{\text{grad}E_i} \partial_i v d\Omega$$

las cuatro integrales que la componen pueden minorarse de la forma siguiente:

El término de difusión es elemental:

$$(a) \quad \lambda \int_{\Omega} |\overline{\text{grad}v}|^2 d\Omega = \lambda |v|_1^2$$

El término de convección, utilizando una integración por partes, puede minorarse de la forma:

$$\int_{\Omega} \text{div}(\overline{E}v)v d\Omega = \frac{1}{2} \int_{\Omega} v^2 \text{div}\overline{E} \leq \frac{1}{2} \|v\|_{L^2}^2 \|\text{div}\overline{E}\|_{\infty}$$

Como $v \in H^1(\Omega)$ y $v|_{\Gamma_D} = \bar{v} \in L^2(\Gamma_D)$, se tiene que:

existe un $c = c(\Omega) > 0$ tal que $\|v\|_{L^2} \leq c|v|_1$ (desigualdad de Poincaré)

Y por lo tanto:

$$(b) \quad \int_{\Omega} \text{div}(\overline{E}v)v d\Omega \geq -\frac{1}{2}c^2 \|\text{div}\overline{E}\|_{\infty} |v|_1^2$$

Por último, por lo que respecta a los términos de difusión artificial, y teniendo en cuenta que:

$$\int_{\Omega} \partial_i v \partial_j (E_i E_j v) d\Omega = \int_{\Omega} \partial_i v \partial_j v (E_i E_j) d\Omega + \int_{\Omega} v \partial_i v \partial_j (E_i E_j) d\Omega = \\ = \int_{\Omega} (\overline{E} \overline{\text{grad}v})^2 d\Omega + \int_{\Omega} v \partial_i v E_i \partial_j E_j d\Omega + \int_{\Omega} v \partial_i v E_j \partial_j (E_i) d\Omega = \\ = \int_{\Omega} (\overline{E} \overline{\text{grad}v})^2 d\Omega + \int_{\Omega} v (\overline{E} \overline{\text{grad}v}) \text{div}\overline{E} d\Omega + \int_{\Omega} v \overline{E} \overline{\text{grad}E_i} \partial_i v d\Omega$$

la suma de los dos términos de difusión artificial se puede expresar como:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \delta_p \int_{\Omega} \partial_i v \partial_j (E_i E_j v) d\Omega - \frac{1}{2} \delta_p \int_{\Omega} v \bar{E} \overline{\text{grad} E_i} \partial_i v d\Omega = \\ & = \frac{1}{2} \delta_p \int_{\Omega} (\bar{E} \overline{\text{grad} v})^2 d\Omega + \frac{1}{2} \delta_p \int_{\Omega} v \text{div} \bar{E} (\bar{E} \overline{\text{grad} v}) d\Omega \end{aligned}$$

Teniendo en cuenta que:

$$(i) \quad \int_{\Omega} (\bar{E} \overline{\text{grad} v})^2 d\Omega \geq \beta^2 |v|_1^2 \quad \text{con} \quad \beta^2 > 0$$

ya que si β^2 fuese nulo, el campo eléctrico y el gradiente de concentración de huecos tendrían direcciones ortogonales, situación físicamente imposible, pues no habría variación de la concentración en la dirección del campo eléctrico.

$$\begin{aligned} (ii) \quad & \left| \int_{\Omega} v (\bar{E} \overline{\text{grad} v}) \text{div} \bar{E} d\Omega \right| \leq \frac{1}{2} \delta_p \| E \overline{\text{grad} v} \|_{0,\Omega} \| v \text{div} \bar{E} \|_{0,\Omega} = \\ & = \frac{1}{2} \delta_p \left(\int_{\Omega} (\bar{E} \overline{\text{grad} v})^2 d\Omega \right)^{\frac{1}{2}} \left(\int_{\Omega} |v \text{div} \bar{E}|^2 d\Omega \right)^{\frac{1}{2}} \leq \\ & \leq \frac{1}{2} \delta_p \| \bar{E} \|_{\infty} |v|_{1,\Omega} \| \text{div} \bar{E} \|_{\infty} \| v \|_{0,\Omega} \leq \frac{1}{2} \delta_p c \| \bar{E} \|_{\infty} \| \text{div} \bar{E} \|_{\infty} |v|_{1,\Omega}^2 \end{aligned}$$

de donde se deduce:

$$\int_{\Omega} v \text{div} \bar{E} (\bar{E} \overline{\text{grad} v}) d\Omega \geq -c \| \text{div} \bar{E} \|_{\infty} \| \bar{E} \|_{\infty} |v|_1^2$$

De (i) e (ii) se tiene que:

$$\begin{aligned} (c) \quad & \frac{1}{2} \delta_p \int_{\Omega} \partial_i v \partial_j (E_i E_j v) d\Omega - \frac{1}{2} \delta_p \int_{\Omega} v \bar{E} \overline{\text{grad} E_i} \partial_i v d\Omega \geq \\ & \geq \frac{1}{2} \delta_p (\beta^2 - c \| \text{div} \bar{E} \|_{\infty} \| \bar{E} \|_{\infty}) |v|_1^2 \end{aligned}$$

Finalmente de (a), (b) y (c) se obtiene una cota inferior para $a_2(v, v)$ de la forma:

$$a_2(v, v) \geq \alpha_2 |v|_1^2$$

con

$$\alpha_2 = \lambda - \frac{1}{2} c^2 \| \text{div} \bar{E} \|_{\infty} + \frac{1}{2} \delta_p (\beta^2 - c \| \text{div} \bar{E} \|_{\infty} \| \bar{E} \|_{\infty})$$

Con el mismo tipo de técnica se minora $a_3(w, w)$, obteniéndose:

$$\alpha_3(w, w) \geq \alpha_3 |w|_1^2$$

con

$$\alpha_3 = \lambda - \frac{1}{2} c^2 \| \text{div} \bar{E} \|_{\infty} + \frac{1}{2} \delta_n (\beta^2 - c \| \text{div} \bar{E} \|_{\infty} \| \bar{E} \|_{\infty})$$

diferenciándose únicamente las constantes α_2 y α_3 en los coeficientes de difusión δ_p y δ_n . Por lo tanto para estudiar la elipticidad de las ecuaciones (51) y (52) hay que discutir los valores de α_2 (α_3) en función de δ_p (δ_n) y el denominado desequilibrio térmico:

$$\| \operatorname{div} \bar{E} \|_{\infty} = \| \Delta u \|_{\infty} = \| \chi + v - w \|_{\infty}$$

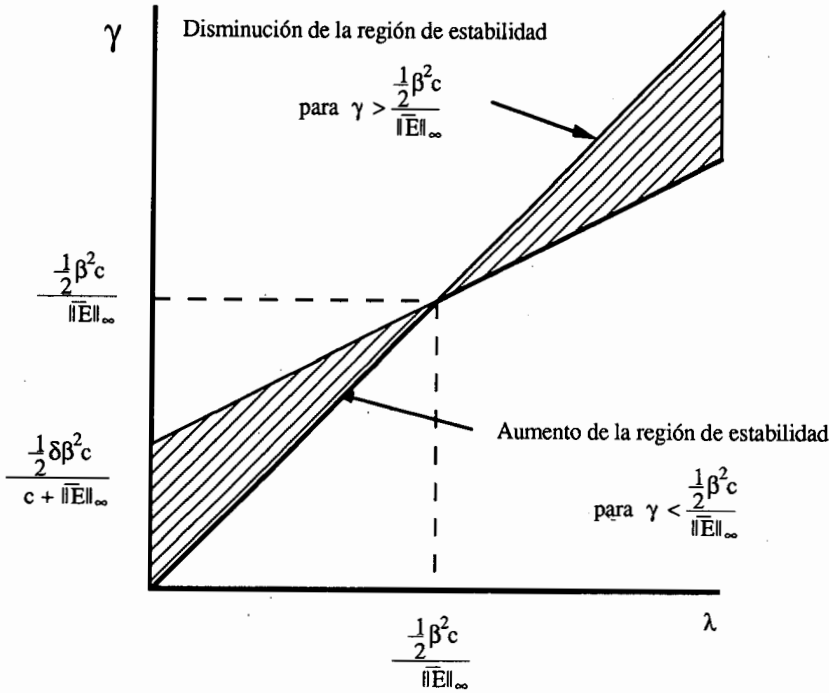


Figura 1. Análisis de la estabilidad.

En lo sucesivo se designará a α_2 y α_3 indistintamente por α y a δ_p y δ_n por δ . En ambos casos se puede expresar α como:

$$\alpha = \alpha_0 + \frac{1}{2} \delta (\beta^2 - c \| \operatorname{div} \bar{E} \|_{\infty} \| \bar{E} \|_{\infty})$$

donde:

$$\alpha_0 = \lambda - \frac{1}{2} c^2 \| \operatorname{div} \bar{E} \|_{\infty}$$

representa la constante de elipticidad para una formulación variacional de la segunda o de la tercera ecuación del sistema (19). En primer lugar, se intentará determinar en qué situaciones el método de difusión artificial aporta alguna ganancia en elipticidad. Para ello se define

$$\gamma = \frac{1}{2} c^2 \| \operatorname{div} \bar{E} \|_{\infty}$$

con lo que α se puede expresar como:

$$\alpha = \lambda - \gamma + \delta \left(\frac{1}{2} \beta^2 - \frac{\gamma \| \bar{E} \|_{\infty}}{c} \right)$$

Esta expresión de α permite representar gráficamente los valores de γ y λ para los cuales el problema modificado y el inicial son estables. Véase la Figura 1. La recta $\lambda = \gamma$ separa la región de estabilidad de la región de no estabilidad para el problema inicial. Si $\gamma > \lambda$ el problema es inestable y si $\gamma < \lambda$ el problema es estable.

La recta

$$\gamma = \frac{\lambda + \frac{1}{2} \delta \beta^2}{1 + \frac{\delta \| \bar{E} \|_{\infty}}{c}}$$

separa la región de estabilidad de la región de no estabilidad para el problema modificado. La ordenada en el origen de la segunda recta es:

$$\gamma_0 = \frac{\frac{1}{2} \delta \beta^2 c}{c + \delta \| \bar{E} \|_{\infty}}$$

y su pendiente es menor que la de la primera recta y ambas se cortan en el punto:

$$\gamma = \lambda = \frac{\frac{1}{2} \beta^2 c}{\| \bar{E} \|_{\infty}}$$

Observando la representación gráfica se puede afirmar que

$$(a) \quad \text{Si } \gamma < \frac{\frac{1}{2} \beta^2 c}{\| \bar{E} \|_{\infty}} \text{ y } \lambda > \frac{\frac{1}{2} \beta^2 c}{\| \bar{E} \|_{\infty}}$$

tanto el problema inicial como el modificado son estables.

$$(b) \quad \text{Si } \gamma > \frac{\frac{1}{2} \beta^2 c}{\| \bar{E} \|_{\infty}} \text{ y } \lambda < \frac{\frac{1}{2} \beta^2 c}{\| \bar{E} \|_{\infty}}$$

tanto el problema inicial como el modificado son inestables.

$$(c) \quad \text{Si } \gamma < \frac{\frac{1}{2} \beta^2 c}{\| \bar{E} \|_{\infty}} \text{ y } \lambda < \frac{\frac{1}{2} \beta^2 c}{\| \bar{E} \|_{\infty}}$$

la región de estabilidad se incrementa al modificar el problema: para un valor dado de λ la cota superior de los desequilibrios térmicos admisibles aumenta. A medida que aumenta λ la ganancia es menor. En el punto en el que

$$\lambda = \frac{\frac{1}{2} \beta^2 c}{\| \bar{E} \|_{\infty}}$$

la modificación del sistema no aporta ninguna mejora.

$$(d) \quad \text{Si } \gamma > \frac{\frac{1}{2} \beta^2 c}{\| \bar{E} \|_{\infty}} \text{ y } \lambda > \frac{\frac{1}{2} \beta^2 c}{\| \bar{E} \|_{\infty}}$$

la región de estabilidad disminuye al modificar el problema. Para una longitud de Debye dada, el máximo desequilibrio térmico admisible disminuye en la formulación con difusión artificial.

En resumen, el hecho de añadir términos de difusión artificial supone una ganancia en estabilidad siempre y cuando tenga:

$$\gamma < \frac{\frac{1}{2}\beta^2 c}{\|\bar{E}\|_\infty} \quad \text{y} \quad \lambda < \frac{\frac{1}{2}\beta^2 c}{\|\bar{E}\|_\infty}$$

La ganancia en estabilidad depende por lo tanto del parámetro δ . Si se expresa la recta de división de la región de estabilidad como:

$$\gamma = \frac{\lambda}{1 + \frac{\delta\|\bar{E}\|_\infty}{c}} + \frac{\delta\beta^2}{2(1 + \frac{\delta\|\bar{E}\|_\infty}{c})}$$

se observa que cuanto mayor sea δ la pendiente de la recta es menor y la ordenada en el origen aumenta. Cuando $\delta \rightarrow \infty$, la recta tiende hacia

$$\gamma = \frac{1}{2} \frac{\beta^2 c}{\|\bar{E}\|_\infty}$$

En el caso de los dispositivos semiconductores, los valores típicos de λ son muy pequeños ($\approx 10^{-17}$). Aunque es difícil estimar teóricamente los valores típicos de β y c , los valores tan pequeños de λ hacen suponer que en la mayoría de los dispositivos semiconductores $\lambda < \frac{1}{2} \frac{\beta^2 c}{\|\bar{E}\|_\infty}$ salvo que $\|\bar{E}\|_\infty$ sea muy grande (variaciones bruscas del potencial, fuertes desequilibrios térmicos). En consecuencia, en los dispositivos semiconductores, al añadir los términos de difusión artificial se consigue aumentar el valor de los desequilibrios térmicos admisibles (aquellos que hacen las formas bilineales elípticas).

APROXIMACIÓN NUMÉRICA

En el apartado anterior se ha concluido que para valores suficientemente pequeños del desequilibrio térmico y de la longitud de Debye, se aumenta la elipticidad de las ecuaciones al añadir los términos de difusión artificial. Ante la dificultad de estimar teóricamente el valor óptimo del coeficiente de difusión artificial, se propone un método práctico — utilizando como estimador del error la carga neta en el semiconductor — para la obtención del valor óptimo del parámetro cuando se aplica la difusión artificial a problemas concretos. Para ponerlo en práctica es necesario, en primer lugar, aproximar numéricamente el sistema de ecuaciones.

La aproximación numérica del sistema formado por las ecuaciones (30), (31) y (32) se realiza en dos etapas: en primer lugar se aproxima la no linealidad del sistema mediante un esquema iterativo, y posteriormente se aproxima el sistema resultante en cada paso del esquema iterativo. Para la aproximación de la no linealidad se ha utilizado un método iterativo de punto fijo generalizado^{7y8}: el sistema de ecuaciones (30), (31) y (32) se transforma en la ecuación vectorial $A\bar{y} + b(\bar{y}) = c(\bar{y})$ (35), en donde

- * $\bar{y} = (u, v, w)^t$, $\bar{y} \in Y$, $Y = \bar{y} \in (H_0^1(\Omega))^3$, $\bar{y} = 0$ en Γ_0
 * A es un operador lineal que aplica Y en Y^* (Y^* dual topológico de Y):

$$A : Y \rightarrow Y^*$$

$$\bar{y} \rightarrow A\bar{y}$$

$$A = - \begin{bmatrix} \Delta & 0 & 0 \\ 0 & \lambda\Delta & 0 \\ 0 & 0 & \lambda\Delta \end{bmatrix}$$

* b es un operador no lineal:

$$b : Y \rightarrow Y^*$$

$$\bar{y} \rightarrow (b(\bar{y}))$$

que se puede linealizar de la forma:

$$b(\bar{y}) = B_0(\bar{y})\bar{y}$$

donde:

$$B_0(\bar{y}) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ -\text{div}(v\overline{\text{grad}}\cdot) & -\frac{1}{2}\delta_p E_i E_j (\partial_{ij}^2 \cdot) & 0 \\ \text{div}(v\overline{\text{grad}}\cdot) & -\frac{1}{2}\delta_p \overline{E} \overline{\text{grad}} E_i (\partial_i \cdot) & -\frac{1}{2}\delta_n E_i E_j (\partial_{ij}^2 \cdot) \\ & 0 & -\frac{1}{2}\delta_n \overline{E} \overline{\text{grad}} E_i (\partial_i \cdot) \end{bmatrix}$$

* c es un operador no lineal:

$$c : Y \rightarrow y^*$$

$$\bar{y} \rightarrow c(\bar{y})$$

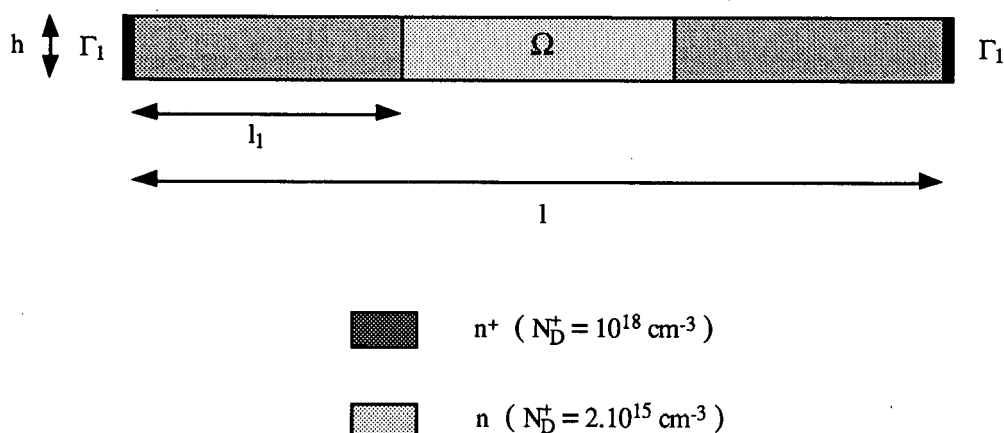
donde $c(\bar{y}) = (\chi + v - w, S_1(v, w), S_2(v, w))$

Al utilizar el método de punto fijo se obtiene el esquema iterativo siguiente:
 $\bar{y}^{n+1} = \bar{y}^n - \rho_{n+1} A^{-1} \bar{r}(\bar{y}^n)$, en donde $\bar{r}(\bar{y})$ es el residuo de la ecuación vectorial (35) y ρ_{n+1} es un parámetro de relajación. En cada paso del esquema iterativo hay que resolver el sistema: $A\bar{\varphi}(\bar{y}^n) = \bar{r}(\bar{y}^n) +$ condiciones de contorno. Para resolver este sistema se aproxima el espacio de soluciones Y con un espacio de dimensión finita de elementos finitos P_1 de Lagrange. Para la obtención de resultados se han programado las dos fases de la aproximación en el código SEMICON.

APLICACIÓN A UN CASO CONCRETO

Como caso concreto se plantea el modelado de una estructura $n^+ - n - n^+$ de silicio a 300 K de temperatura, para la que se calcula la concentración de electrones y el potencial.

A continuación se describen la geometría, el perfil de dopado y las condiciones de contorno del problema.



$$l = 1.2 \mu\text{m}, \quad l_1 = 0.4 \mu\text{m}, \quad h = 0.1 \mu\text{m}$$

Figura 2. Estructura $n^+ - n - n^+$.

Perfil de dopado:

$$\begin{aligned} &10^6 \mu\text{m}^{-3} \quad \text{si } 0 \leq x \leq 0.4 \quad \text{ó} \quad 0.8 \leq x \leq 1.2 \\ &2.10^3 \mu\text{m}^{-3} \quad \text{si } 0.4 \leq x \leq 0.8 \end{aligned}$$

Condiciones de contorno:

En Γ_1 :

$$\begin{aligned} \Psi &= 0 \text{ V } (\Psi_{\text{apli}} = -\Psi_{\text{nat}} = -0.476 \text{ V}) \\ n &= 10^6 \mu\text{m}^{-3} \end{aligned}$$

En el resto de la frontera:

$$\partial_\gamma \Psi = \partial_\gamma n = 0$$

Además, las características del silicio son las siguientes:

$$\begin{aligned} \text{.coeficiente de difusión de electrones: } &d_n = 3.885 \mu\text{m}^2/\text{s} \\ \text{.}\epsilon_s/\epsilon_0 &= 12.51 \end{aligned}$$

y la longitud de Debye viene dada por:

$$\lambda = \frac{\varepsilon_s \varepsilon_0 kT}{q^2 C_0} = 1.78726 \cdot 10^{-5} \mu m^2$$

El objetivo perseguido al resolver con el código SEMICON este problema es comprobar que, al añadir los términos de difusión artificial, la solución mejora. También se pretende alcanzar numéricamente un valor para el coeficiente de difusión artificial δ_n lo más cercano posible al óptimo.

Para aproximar la geometría del semiconductor se ha realizado un mallado (245 nodos) que intenta adaptarse a la solución: la longitud h no es constante, ya que disminuye en las proximidades de las homouniones, zonas en la que se producen altos gradientes tanto en la concentración de huecos como en el potencial. El mallado se representa en la Figura 3.



Figura 3

A continuación se presentan las soluciones obtenidas. Se resuelven cuatro problemas, uno sin difusión artificial ($\delta_n = 0$), otro con el mejor δ_n alcanzado, y por último, con el objeto de mostrar la evolución de la solución al aumentar el valor de δ_n , se resuelven dos problemas más: uno con $0 < \delta_n < \delta_{opt}$ y otro con $\delta_n > \delta_{opt}$. Para cada problema se suministran los siguientes datos, referentes a la solución obtenida: el potencial escalado, la concentración escalada de electrones, la variación de los valores globales de la norma al cuadrado del residuo y la norma al cuadrado del estado adjunto a lo largo del proceso iterativo. Para facilitar su interpretación todos estos resultados se suministran de forma gráfica.

Potencial

Teniendo en cuenta las condiciones de contorno enunciadas en el planteamiento del problema, y suponiendo que existe conservación de carga en el dispositivo semiconductor — suposición realizada al obtener las condiciones de contorno esenciales (5), (6) y (7) — el campo eléctrico en los extremos del mismo debe ser nulo y por lo tanto también la pendiente de la curva de potencial en el origen. Además, al atravesar la zona de contacto entre la región de dopado n^+ y la región de dopado n , llamada homounión, aparece un campo eléctrico positivo que provoca una brusca caída del potencial. Al volver a atravesar la zona de contacto aparece un campo eléctrico negativo que provoca un brusco aumento del potencial.

Estos datos iniciales, el resultado obtenido por [5] con el modelo cinético y la estimación local y global del error permiten hacer un análisis de la solución obtenida.

En el caso $\delta_n = 0$ (resolución del problema sin difusión artificial), el potencial escalado u alcanza un pico máximo de $1.06 \cdot 10^{-4} \mu\text{m}^2$ ($\Psi = 0.15 \text{ V}$) en los nodos $x = 0.35$ y $x = 0.75$, y la pendiente inicial de la curva es positiva. El potencial alcanza el valor mínimo en la región n con un valor de $-3.65 \cdot 10^{-4} \mu\text{m}^2$ ($\Psi = -0.51 \text{ V}$), valor que permanece constante a lo largo de dicha región. El potencial es simétrico respecto al punto $x = 0.6$. Esta solución no es satisfactoria, pues no respeta la condición de campo eléctrico nulo en los extremos. Además, la variación del potencial en la región n^+ , más que corresponderse con la realidad, se asemeja a una inestabilidad debida a la no elipticidad del sistema de ecuaciones.

Al aumentar el valor del parámetro de difusión artificial a $\delta_n = 0.5036$, se observa que la solución se suaviza, disminuyendo tanto el valor máximo de V como la pendiente en el origen. Como se verifica al comprobar el valor de los estimadores, esta solución parece mejor que la anterior.

El siguiente valor del parámetro de difusión artificial empleado es $\delta_{\text{opt}} = 1.0303$. Este valor se ha obtenido minimizando la integral de la densidad de carga a lo largo del dominio Ω .

$$\int_{\Omega} (\chi - w) d\Omega = \text{carga neta en el dispositivo}$$

Una solución del sistema de ecuaciones (12) en la que $\partial_\nu u = 0$ a lo largo de toda la frontera debe verificar que la carga neta sea nula. La carga neta será por lo tanto un buen estimador de la solución obtenida al aplicar el código SEMICON, siempre y cuando la derivada normal del potencial sea nula en la frontera del dominio. Además también se verifica que para valores de δ_n menores que δ_{opt} la carga neta es mayor que cero, mientras que para valores mayores que δ_{opt} es negativa. Esto último permite, mediante una sencilla búsqueda binaria, acotar el valor de δ_{opt} (el proceso de búsqueda se detiene cuando el valor absoluto de la carga neta es menor o igual que $10^{-17} \mu\text{m}^2$).

Al emplear δ_{opt} como valor para δ_n se observa como la curva del potencial se ha suavizado de forma importante, siendo prácticamente plana en el centro de las regiones n y n^+ y variando únicamente en las homouniones, $u_{\text{max}} = 1.112 \cdot 10^{-6} \mu\text{m}^2$ ($\Psi = 1.608 \cdot 10^{-3} \text{ V}$) y $u_{\text{min}} = -6.03 \cdot 10^{-4} \mu\text{m}^2$ ($\Psi = -0.8722 \text{ V}$). El valor de la carga neta es en este caso $-7.252 \cdot 10^{-18} \mu\text{m}^2$, mientras que con $\delta_n = 0$ era $6.003 \cdot 10^{-5} \mu\text{m}^2$, y con $\delta_n = 0.504$ $2.412 \cdot 10^{-5} \mu\text{m}^2$. Al tomar como referencia el resultado obtenido por [5] se observa también que la curva de potencial obtenida con $\delta_n = \delta_{\text{opt}}$ es la más satisfactoria.

Por último se ha tomado como valor de δ_n 16.7855, con la intención de mostrar cómo al utilizar un valor mayor que δ_{opt} la solución obtenida vuelve a alejarse de la solución real: la pendiente de u en el origen es ahora negativa, el valor máximo es $u_{\text{max}} = 0 \mu\text{m}^2$ ($\Psi = 0 \text{ V}$), el valor mínimo es $u_{\text{min}} = -935 \cdot 10^{-3} \mu\text{m}^2$ ($\Psi = -13.52 \text{ V}$), y el valor de la carga neta vale $-8.987 \cdot 10^{-4} \mu\text{m}^2$.

Aunque los valores globales de la norma del residuo y de la norma del estado adjunto (dirección de descenso del método iterativo) son los mejores para este último valor de δ_n , su distribución espacial no coincide en absoluto con lo que cabría esperar,

245 NODOS DELTA=0.0

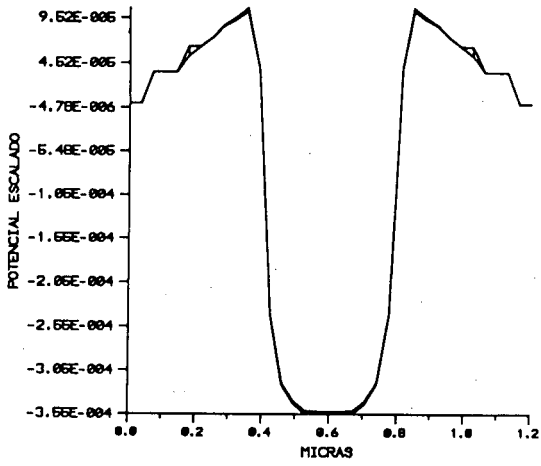


Figura 4

245 NODOS DELTA=0.5036

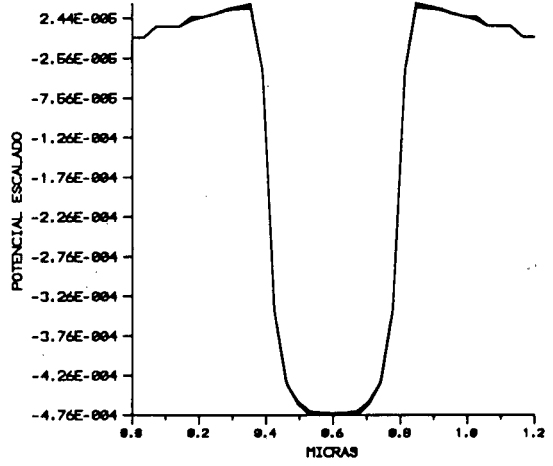


Figura 5

245 NODOS DELTA=1.0303

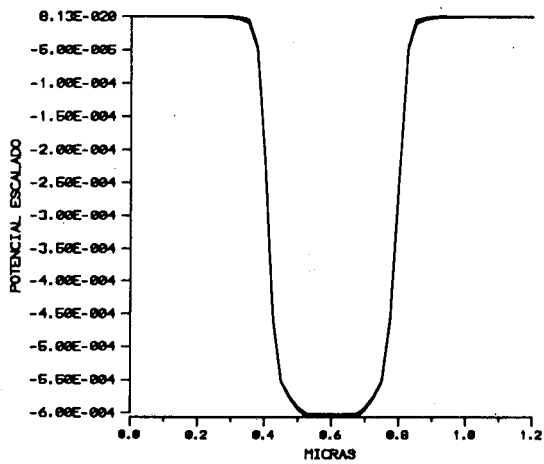


Figura 6

245 NODOS DELTA=16.7855

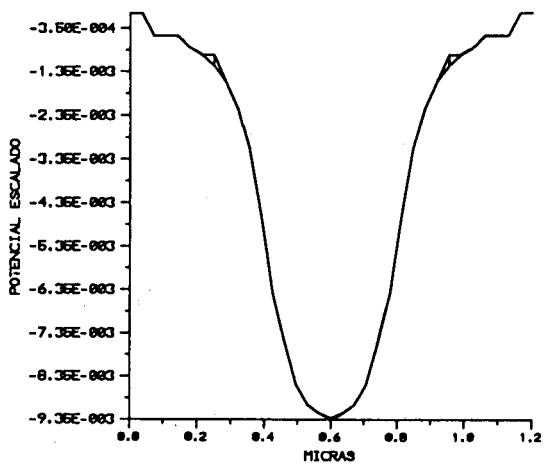


Figura 7

245 NODOS DELTA=1.0303

245 NODOS DELTA=16.7855

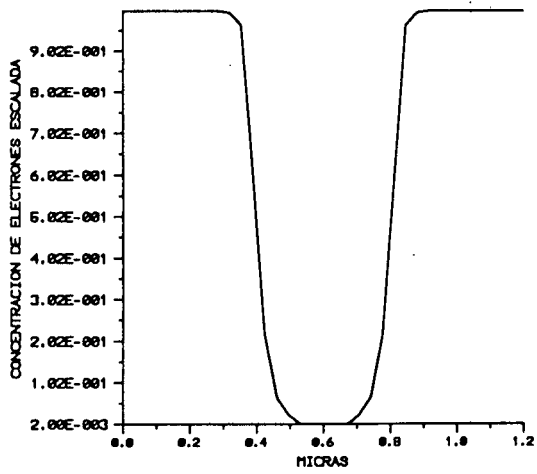


Figura 8

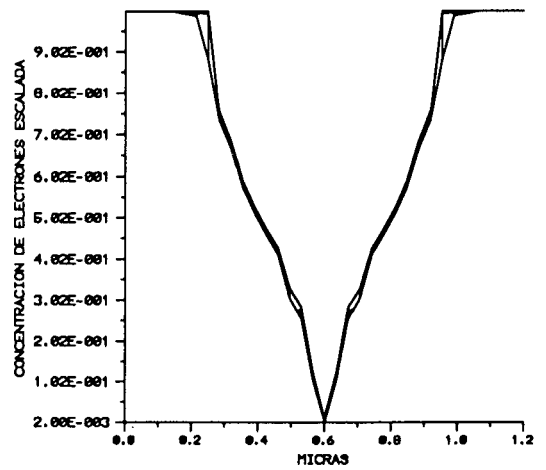


Figura 9

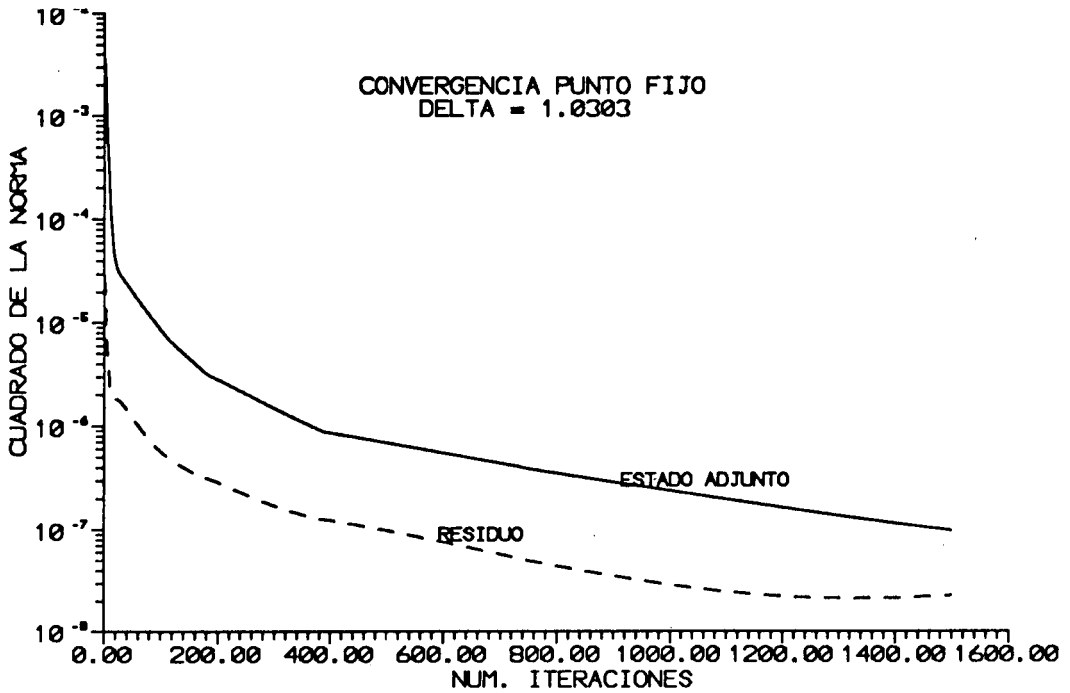


Figura 10

pues en las zonas de altos gradientes — $x = 0.4$, $x = 0.8$ — el error es mínimo. El problema converge, pero hacia una solución distinta de la real.

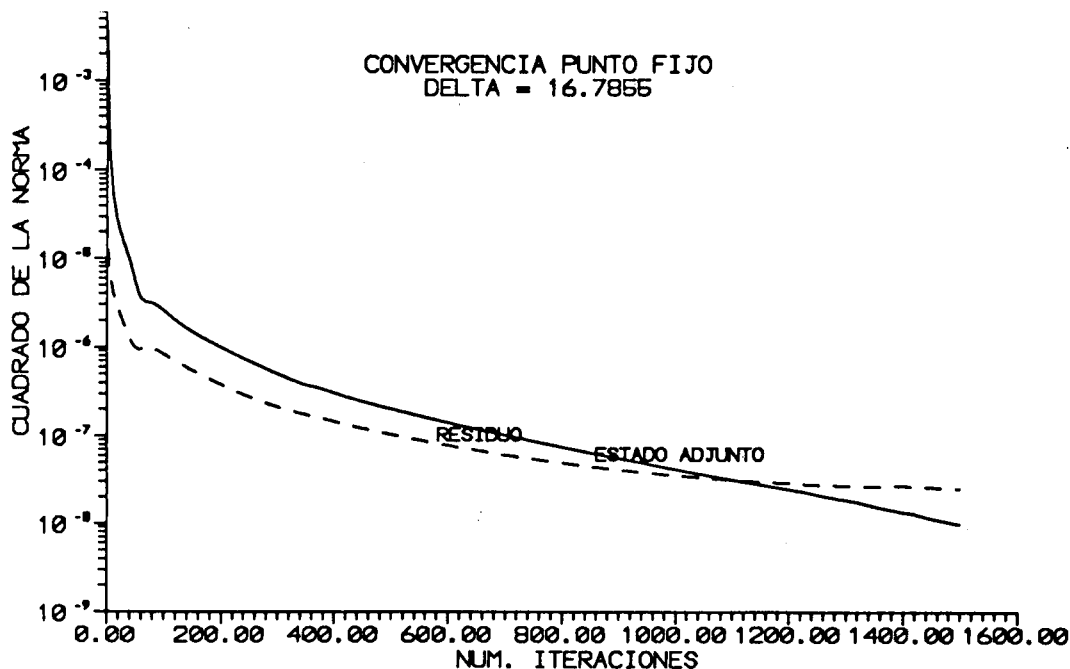


Figura 11

Concentración de electrones

En lo que a la concentración de electrones se refiere, se han representado las curvas correspondientes a $\delta_n = \delta_{\text{opt}}$ y $\delta_n = 16.7855$. Se ha dejado sin representar el resto de las curvas, debido a que a la escala en que se puede dibujar la gráfica abarcando todo el dominio, no existe diferencia visual apreciable entre los valores obtenidos con $\delta_n = 0$ y $\delta_n = \delta_{\text{opt}}$. En efecto, la concentración escalada de electrones, w , varía entre 1 y $2 \cdot 10^{-3}$, y la diferencia máxima entre los valores de w en un mismo nodo correspondientes a $\delta_n = 0$ y $\delta_n = \delta_{\text{opt}}$ es del orden de $5 \cdot 10^{-3}$. Examinando los resultados numéricos se puede apreciar que a medida que aumenta el valor de δ_n desde 0 hasta δ_{opt} la pendiente de la curva en la zona de transición disminuye. El único aspecto, en lo que se refiere a la comparación de resultados entre distintos valores de δ_n , que se puede apreciar en las curvas de concentración de electrones es que, al igual que sucedía con el potencial al utilizar valores de δ_n tan grandes como 16.7855, la solución se desvirtúa completamente: se suaviza al desaparecer los fuertes gradientes de la zona de transición, pero ésto, evidentemente, no tiene nada que ver con la realidad.

Curvas del error global a lo largo del proceso iterativo

Las curvas que representan los valores globales de la norma al cuadrado del residuo y de la norma al cuadrado del estado adjunto — Figuras 10 a 11 — sirven para evaluar el grado de convergencia y estabilidad de la solución alcanzada. Cuanto mayor es el valor de δ_n , el valor final de ambas normas es más pequeño. Al pasar de $\delta_n = 0$ a $\delta_n = \delta_{\text{opt}}$ la diferencia es pequeña; sin embargo, al alcanzar δ_n el valor $\delta_n = 16.7885$ se obtienen unos valores de los cuadrados de las normas diez veces inferiores a los que se obtenían para $\delta_n = 0$. Esto implica que desde el punto de vista del residuo y del estado adjunto, la mejor solución es la correspondiente al δ_n más grande. Este resultado es contradictorio con los resultados de potencial, concentración de electrones y carga neta vistos anteriormente. Esta contradicción la origina el hecho de que las normas del residuo y del estado adjunto son buenos estimadores del error para el problema modificado con los términos de difusión artificial pero no para el problema real: el problema correspondiente a $\delta_n = 16.7885$ es el que converge más rápidamente hacia una solución, pero hacia una solución que no es la que corresponde al problema que se intenta resolver.

CONCLUSIONES

Se ha presentado en el artículo un nuevo método de difusión artificial para la resolución del sistema de ecuaciones que representa un dispositivo semiconductor en estado estacionario. Se ha justificado tanto teórica como numéricamente la mayor estabilidad conseguida por la difusión artificial. Ante la dificultad de estimar teóricamente el valor óptimo del coeficiente de difusión artificial se ha propuesto un método práctico — utilizando como estimador del error la carga neta en el semiconductor — para la obtención del valor óptimo del parámetro cuando se aplica la difusión artificial a problemas concretos. También se ha comprobado teóricamente como para cualquier valor del parámetro de difusión artificial, siempre que el desequilibrio térmico y la longitud de Debye sean suficientemente pequeños, se produce un aumento en la elipticidad de la solución al emplear el sistema de ecuaciones modificado.

LISTA DE SÍMBOLOS

- c = Constante de Poincaré.
- C = Concentración de impurezas.
- C_0 = Concentración de impurezas máxima.
- d_p = Coeficiente de difusión para huecos.
- d_n = Coeficiente de difusión para electrones.
- \bar{E} = Campo eléctrico escalado.
- k = Constante de Boltzmann.
- n = Concentración de electrones.
- n_i = Concentración intrínseca de barrera.
- N_A^- = Concentración de impurezas aceptoras.
- N_D^+ = Concentración de impurezas dadoras.

p	=	Concentración de huecos.
q	=	Carga del electrón.
T	=	Temperatura absoluta en grados Kelvin.
u	=	Potencial escalado.
U_T	=	Potencial térmico.
v	=	Concentración de huecos escalada.
w	=	Concentración de electrones escalada.
α	=	Constante de elipticidad.
δ_n	=	Parámetro de difusión artificial (electrones).
δ_p	=	Parámetro de difusión artificial (huecos).
γ	=	Desequilibrio térmico.
Δt	=	Paso de tiempo para la discretización temporal.
ϵ	=	Permitividad eléctrica del medio.
ϵ_0	=	Permitividad eléctrica en el vacío.
ϵ_s	=	Permitividad eléctrica en el silicio.
λ	=	Longitud de Debye.
ξ	=	Concentración intrínseca de barrera escalada.
μ_p	=	Movilidad de los huecos.
μ_n	=	Movilidad de los electrones.
ν	=	Normal unitaria exterior en la frontera del dominio.
ρ	=	Densidad de carga eléctrica.
χ	=	Concentración de impurezas escalada.
Ψ	=	Potencial eléctrico
Ψ_{nat}	=	Potencial natural debido a la distribución de cargas en el contacto óhmico.
Ψ_{apl}	=	Potencial aplicado externamente.

REFERENCIAS

1. J. Douglas Jr., T.F. Russell, "Numerical Methods for Convection dominated Diffusion problems based on combining the method of Characteristics with Finite Elements or Finite Differences Procedures", *SIAM J. Num. Anal.*, Vol. **19**, No. 5, pp. 871-885, (1982).
2. C. Johnson, "Numerical Solution of Partial Differential Equations by the Finite Element Method", Cambridge University Press, Cambridge, (1987).
3. P.A. Markowich, "The Stationary Semiconductor Device Equations", Springer-Verlag, Viena, New York, (1986).
4. R. Montenegro, "Aplicación de Métodos de Elementos Finitos Adaptativos a problemas de Convección-Difusión", *Tesis Doctoral*, E.T.S.I. Industriales de la Universidad Politécnica de Canarias, Las Palmas, (1989).
5. F.J. Mustieles, "L'équation de Boltzmann des Semiconducteurs. Etude Mathématique et Simulation Numérique", *Thèse de Doctorat de l'Ecole Polytechnique*, Paris, (1990).
6. O. Pironneau, "On the Transport-diffusion algorithm and its application to the Navier-Stokes equations", *Num. Math.*, No. 38, pp. 309-332, (1982).
7. S. de Vicente, F. Castro, C. Conde, "Métodos de punto fijo para la aproximación de un problema de la física de semiconductores", *XI C.E.D. Y.A.*, Fuengirola, (1989).

8. S. de Vicente, F. Castro, J. Izquierdo, "Un método de mínimos cuadrados no lineales para la aproximación de las ecuaciones de deriva-difusión", *I Congreso de Métodos Numéricos en Ingeniería*, Las Palmas de Gran Canaria, pp. 601-608 (1990).
9. G. Winter, R. Montenegro, G. Montero, L. Ferragut, "Aplicación de métodos de elementos finitos adaptativos a problemas de convección-difusión en 2D", *Rev. Int. de Mét. Num. para Cál. y Dis. en Ing.*, Vol. 5, No. 4, pp. 535-560, (1989).
10. O.C. Zienkiewicz, R.L. Taylor, "*The finite element method*", 4a. edición, Vol. 2, McGraw Hill, (1991).