

Рівненський державний гуманітарний університет
Факультет математики та інформатики
Кафедра інформаційних технологій та моделювання

«До захисту допущено»

Завідувач кафедри

_____ Мороз І.П.

протокол № ____

від _____

Дипломний проект (робота)

Ступеня бакалавр

з спеціальності 113 Прикладна математика

на тему: ЗАСТОСУВАННЯ ПАКЕТУ МАТЕМАТИЧНИХ ПРОГРАМ MAPLE
У МОДЕЛЮВАННІ ДИФУЗІЙНО-ДРЕЙФОВИХ ПРОЦЕСІВ

Виконав: студента IV курсу, групи ПМ-21(2р)

Махобей Вадим В'ячеславович

(підпис)

Керівник: к.ф.-м.н., доц. Мороз І.П.

(підпис)

Рецензенти _____
(посада, науковий ступінь, прізвище та ініціали)

(підпис)

Рівне, 2023 рік

Зміст

ВСТУП.....	4
РОЗДІЛ 1 ПРОБЛЕМАТИКА МАТЕМАТИЧНОГО МОДЕЛЮВАННЯ ХАРАКТЕРИСТИК ЕЛЕКТРОННИХ ПРИСТРОЇВ	7
1.1 Базові поняття. Проблема математичного моделювання характеристик р-і- п-діодів.....	7
1.2 Математичне моделювання процесів перенесення електронно-діркових струмів у р-і-п-діодах в гідродинамічному наближенні	9
1.3. Основні труднощі розв’язання модельних задач напівпровідникової електроніки.....	11
РОЗДІЛ 2 ВИКОРИСТАННЯ МЕТОДУ ПРИМЕЖОВИХ ФУНКЦІЙ У МАТЕМАТИЧНОМУ МОДЕЛЮВАННІ ХАРАКТЕРИСТИК ПЛАЗМИ АКТИВНОЇ ОБЛАСТІ Р-І-N-СТРУКТУР	15
2.1. Математична постановка задачі	15
2.2. Застосування методу примежових функцій для проведення декомпозиції базової задачі.....	16
РОЗДІЛ 3 ІНСТРУМЕНТАЛЬНІ ЗАСОБИ КОМП’ЮТЕРНОГО МОДЕЛЮВАННЯ ЗАДАЧ НАПІВПРОВІДНИКОВОЇ ЕЛЕКТРОНІКИ.....	22
3.1. Математичні пакети	22
3.2. Спеціалізовані програми.....	23
РОЗДІЛ 4 РОЗРОБКА ЧИСЕЛЬНИХ АЛГОРИТМІВ МОДЕЛЮВАННІ ХАРАКТЕРИСТИК ПЛАЗМИ АКТИВНОЇ ОБЛАСТІ Р-І-N-СТРУКТУР	25
4.1. Реалізація модельних алгоритмів	25
4.2. Аналіз результатів моделювання.....	33
ВИСНОВКИ	37
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ	38
ДОДАТКИ.....	40
Додаток А.....	40

ВСТУП

Математичні методи широко використовуються у всіх сферах діяльності людини. Вони допомагають ефективно вирішувати наукові, технічні, економічні, соціальні проблеми сьогодення. Одним із важливих напрямків науково-технічної діяльності є напівпровідникова електроніка.

Електроніка — це галузь техніки, яка займається розробкою та виготовленням напівпровідникових електронних керуючих пристроїв різних типів, таких як мікросхеми, транзистори, діоди. Одним із ключових аспектів електроніки є використання напівпровідникових матеріалів, які мають властивість змінювати провідність електричного струму у залежності від зовнішніх впливів.

Галузь електроніки і, зокрема, мікроелектроніки стала визначальним фактором економічного зростання у сучасному світі. Вона торкається усіх аспектів сучасного життя. Неможливо уявити світ без персональних комп'ютерів, мобільних телефонів, відеокамер, телевізорів, мікрохвильових печей, калькуляторів тощо. Крім споживчих товарів, електронні пристрої також проникли практично в усі важливі сфери діяльності людини: промислову, медичну, транспортну, аерокосмічну, освітню, військову і т.і.

Електроніка переживає феноменальну трансформацію, синхронізуючи її з такими технологічними досягненнями, як IoT (Інтернет речей) або AI (штучний інтелект), які спостерігаються по всьому світу. Зберігання даних (гібридне хмарне сховище), дисплеї наступного покоління (Micro LED), бездротова зарядка, силова електроніка і т.і. є ключовими інноваціями, які матимуть значний вплив на життя людини.

Математичне та комп'ютерне моделювання технічних систем відіграє важливу роль в інженерії та технічних науках. Моделювання дозволяє інженерам та науковцям аналізувати поведінку системи в умовах, які ще не були досліджені або неможливі для експериментальних досліджень, зменшуючи тим самим витрати на експерименти та ризики виникнення небезпек.

Технічні системи можуть бути досить складними, тому математичне та комп'ютерне моделювання дозволяє зрозуміти їхню структуру та взаємодії між їх складовими. Моделювання також допомагає приймати рішення, розробляти стратегії, аналізувати можливості удосконалення системи та прогнозувати результати її роботи.

Крім того, математичні та комп'ютерні моделі можуть бути використані для визначення оптимальних параметрів системи, таких як розміри, конфігурація та матеріали, що дозволяє економити час та кошти на виробництві.

Таким чином, математичне та комп'ютерне моделювання є незамінним інструментом розробки технічних систем, визначення їхньої ефективності та їх удосконалення.

Метою роботи є розробка та реалізація аналітико-числових алгоритмів розв'язання модельних крайових задач напівпровідникової електроніки.

Об'єкт дослідження – модельні крайові нелінійні задачі напівпровідникової електроніки.

Предметом дослідження є алгоритми аналізу відповідних нелінійних крайових задач.

Методи дослідження. Застосовано загальнонаукові підходи до пошуку і аналізу інформації за тематикою дослідження. А також відповідні аналітичні та числові методи розв'язання сингулярно збурених крайових задач.

Для досягнення мети були поставлені наступні **завдання дослідження**:

- пошук тематичної інформації;
- аналіз інформації;
- вивчення елементів базових математичних моделей напівпровідникової електроніки;
- вивчення базових методів розв'язання сингулярно збурених крайових задач;

-проведення декомпозиції нелінійної моделі процесів перенесення електронно-діркових струмів у активній області р-і-n-діодів методами теорії збурень;

-побудова чисельно-аналітичних алгоритмів пошуку асимптотичних розв'язків базової задачі;

-реалізація алгоритмів засобами Maple (C++);

-проведення машинних експериментів.

У процесі виконання роботи отримано наступні результати: зібрано і проаналізовано інформацію по постановці та методах розв'язання крайових задач для звичайних диференціальних рівнянь та дифрівнянь в частинних похідних; розглянуто стандартні функції математичного пакету Maple (C++) для розв'язання відповідних крайових задач та задачі Коші; проведено серію машинних експериментів.

Результати роботи можуть використовуватись у навчальному процесі.

Робота пройшла апробацію на конкурсі студентських наукових робіт (диплом III ступеня) і науковій конференції викладачів і студентів РДГУ (18 травня 2023р.).

РОЗДІЛ 1

ПРОБЛЕМАТИКА МАТЕМАТИЧНОГО МОДЕЛЮВАННЯ ХАРАКТЕРИСТИК ЕЛЕКТРОННИХ ПРИСТРОЇВ

1.1. Базові поняття. Проблема математичного моделювання характеристик р-і-n-діодів.

Електронні пристрої — це технічні пристрої, що призначені для керування потоком електричного струму у першу чергу з метою обробки електронної інформації, фізичним носієм якої є струм. Сучасні електронні пристрої ґрунтуються на технологіях напівпровідникової електроніки. Базовими напівпровідниковими електронними пристроями є діод, транзистор, напівпровідникова мікросхема, тощо. Технічні характеристики електронних пристроїв такі, наприклад, як швидкодія, коефіцієнт підсилення, рівень комутованих сигналів тощо, визначаються низкою фізичних процесів, які протікають у цих пристроях: дифузійно-дрейфові процеси протікання електронно-діркових струмів, процесами рекомбінації носіїв заряду, інжекційними процесами тощо.

Математичне моделювання є одним із засобів вивчення характеристик електронних пристроїв. Математична модель електронного пристрою описує його поведінку відповідно до різних вхідних сигналів та зовнішніх умов. Однією із основних задач математичного моделювання електронних пристроїв є знаходження залежностей між вхідними та вихідними параметрами пристрою. Ці залежності можуть бути використані в проектуванні та оптимізації відповідних технічних систем.

Потрібно відмітити, що математичне моделювання електронних пристроїв має певні обмеження та проблеми. Одна з головних проблем полягає у складності моделювання через необхідність системного врахування низки фізичних ефектів таких, наприклад, як ефект джерела живлення, термоефектів, шумових та інших. Крім того, точність математичної моделі може бути

обмежена якістю даних, на яких вона ґрунтується, складністю врахування всіх можливих взаємодій між компонентами електронного пристрою тощо.

Р-і-n-діод – напівпровідниковий діод, у якому власний шар із високим питомим опором «I» розташований між двома шарами напівпровідникового матеріалу з р (дірковим) та n (електронним) типами провідності [1]. Під струмів інжекції з високолегованих областей у і-область потрапляють носії заряду, утворюючи при цьому електронно-діркову плазму. Плазма змінює провідні властивості і-області: питомий опір її стає низьким. На цьому ґрунтується принцип роботи р-і-n діода. Схематично р-і-n діод показано на рис.1.1.

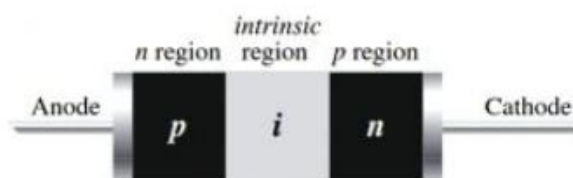


Рис. 1.1. Схематичне зображення структури р-і-n діода

Характеристики р-і-n діода в основному визначаються властивостями електронно-діркової плазми: розподілом зарядів в і-області, її температурою тощо. Математичне моделювання характеристик р-і-n-діода зводиться до побудови та аналізу стаціонарних та динамічних моделей формування плазми. На рис. 1.2. показано схематичний розподіл концентрації електронів та дірок.

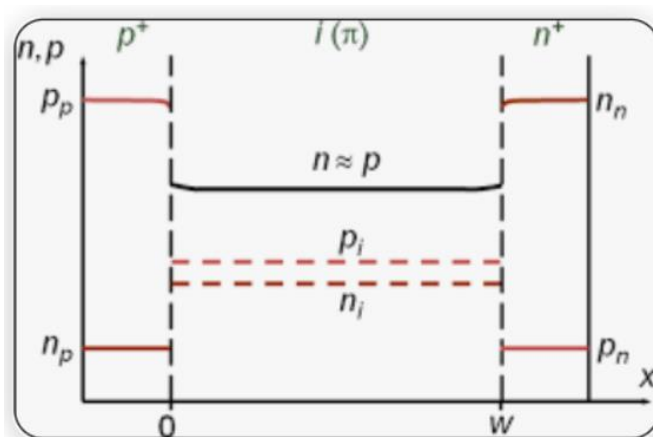


Рис. 1.2. Одновимірна модель розподілу концентрацій носіїв заряду у р-і-n-діоді

Відмітимо, що активна область (і-область) діода є електронейтральною: концентрації позитивно заряджених частинок (дірок) та негативно заряджених

частинок (електронів) приблизно однакові. Проте, це правило, очевидно, порушується поблизу зон р-і та n-і інжектуючих контактів. У відомих літературних джерелах зазначена особливість розподілу носіїв зарядів ніяк невідображена [2].

Очевидно, що виникає потреба в удосконаленні існуючих математичних моделей електронно-діркової плазми р-і-n-діодів.

1.2. Математичне моделювання процесів перенесення електронно-діркових струмів у р-і-n-діодах в гідродинамічному наближенні

Найчастіше для моделювання характеристик напівпровідникових пристроїв (у тому числі і р-і-n-діодів) використовують математичну модель протікання електронно діркових струмів у гідродинамічному наближенні. Основу моделі складають рівняння неперервності електронного та діркового струмів та рівняння Пуасона у наступному вигляді [1-3]:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \varphi}{\partial t} &= -\frac{1}{e} \nabla \cdot \vec{j}_p - R_p + G_p, \\ \frac{\partial n}{\partial t} &= \frac{1}{e} \nabla \cdot \vec{j}_n - R_n + G_n,\end{aligned}\tag{1.1}$$

де:

$$\begin{aligned}\vec{j}_p &= -e\mu_p p \nabla \varphi - eD_p \nabla p, \\ \vec{j}_n &= -e\mu_n n \nabla \varphi + eD_n \nabla n,\end{aligned}\tag{1.2}$$

$$\operatorname{div}(\nabla \varphi) = -e(p - n + N_d).\tag{1.3}$$

У (1.1)-(1.3) використано позначення: $p(x,y,z,t)$, $n(x,y,z,t)$ - розподіли концентрацій носіїв заряду; J - густина струму управління; N_d - профіль легування; $\varphi(x,y,z,t)$ - потенціал; e - заряд електрона; D_p , D_n - коефіцієнти дифузії дірок та електронів відповідно; μ_p , μ_n - рухомості ($\vec{v} = \mu \vec{E}$, \vec{v} - швидкість) носіїв заряду; R_p , R_n , G_p , G_n - швидкості рекомбінації і генерації.

Відмітимо, що рухомості електронів і дірок зв'язані з коефіцієнтами дифузії наступними співвідношеннями [3] (k_B – стала Больцмана, $T=300$ °К - температура):

$$\mu_p \frac{k_B T}{e} = D_p, \quad \mu_n \frac{k_B T}{e} = D_n. \quad (1.4)$$

Швидкість рекомбінації носіїв заряду визначають як рекомбінаційні процеси різного типу, так і властивості матеріалу напівпровідника. Виходячи із складності опису сукупної дії рекомбінаційних процесів для оцінки швидкості рекомбінації використовують наступні феноменологічні співвідношення:

$$R_n = \frac{n - n_0}{\tau_n^*}, \quad R_p = \frac{p - p_0}{\tau_p^*}, \quad (1.5)$$

де τ_p^*, τ_n^* - ефективні релаксаційні часи життя дірок та електронів; n_0, p_0 – концентрації урівноважених електронів та дірок (в активній області p - i - n -діодів концентрації неурівноважених та урівноважених носіїв заряду задовольняють умови $n \gg n_0, p \gg p_0$).

Носії заряду з'являються в активній області p - i - n -діодів також внаслідок процесів генерації носіїв заряду за механізмами ударної іонізації, тунелювання, теплових переходів електронів у зону провідності [1-3], але у даній роботі такі процеси враховуватися не будуть.

Розподіли носіїв заряду та потенціалу $p(x, y, z, t), n(x, y, z, t), \varphi(x, y, z, t)$ потрібно знайти у деякій фізичній області G_i (див., наприклад, рис. 1.2). Рівняння (1.1)-(1.3) доповнюємо наступними граничними умовами на межі області $\partial G_i = L_i$ ($L_i = L_n \cup L_p \cup L_0$) [3,4]:

$$\left(\vec{j}_n \cdot \vec{\nu} \right)_{L_n} - e \alpha_n n = J, \quad \left(\vec{j}_p \cdot \vec{\nu} \right)_{L_n} - e \alpha_p p = 0, \quad (1.6)$$

$$\left(\vec{j}_p \cdot \vec{\nu} \right)_{L_p} + e \alpha_p p = J, \quad \left(\vec{j}_n \cdot \vec{\nu} \right)_{L_p} + e \alpha_n n = 0, \quad (1.7)$$

$$\left(\vec{j}_n \cdot \vec{\nu} \right)_{L_0} - e \alpha_n^* n = 0, \quad \left(\vec{j}_p \cdot \vec{\nu} \right)_{L_0} - e \alpha_p^* p = 0, \quad (1.8)$$

де J – стала, що визначає густину інжекційного струму; $\vec{\nu}$ – вектор нормалі до межі області; $e \alpha_p p, e \alpha_n n, e \alpha_p^* p, e \alpha_n^* n$ – густини поверхневого рекомбінаційного струму; $\alpha_{n,p}, \alpha_{n,p}^*$ - швидкості поверхневої рекомбінації носіїв заряду.

Падіння прикладеної напруги на діоді в основному відбувається на активній області (активна область р-і-п-діода у порівнянні з високолегованими областями є високоомною). Тому граничні умови для потенціалу подають наступним чином:

$$\varphi|_{L_n} = 0, \quad \varphi|_{L_p} = U, \quad (1.9)$$

де U – прикладена напруга. Граничні умови для потенціалу на інших ділянках поверхні: $\frac{\partial \varphi}{\partial \nu}|_{L_0} = 0$.

1.3. Основні труднощі розв'язання модельних задач напівпровідникової електроніки

Моделювання напівпровідникових пристроїв є ключовим етапом в розробці електронних систем, таких як мікросхеми, сонячні батареї, світлодіоди тощо.

Для того, щоб розв'язати модельну задачу напівпровідникової електроніки, дослідники повинні подолати наступні основні труднощі [4].

Труднощі, пов'язані із складністю математичних моделей, що використовуються. Моделювання напівпровідникових пристроїв потребує використання різних математичних методів та рівнянь, таких як рівняння Нав'є-Стокса для опису руху електронів, рівняння Пуассона для визначення електричного поля і рівняння континуальної механіки для визначення механічних напруг і деформацій. Всі ці методи і рівняння пов'язані між собою і результуюча модельна задача стає нелінійною.

Труднощі, що пов'язані із необхідністю врахування розмірних обмежень. Напівпровідникові пристрої мають малий розмір, що вимагає високої точності вимірювань та обмежує можливості моделювання. Частково проблема вирішується введенням нормованих величин.

Нестабільність: Напівпровідники мають складну структуру та фізичні властивості, що може призводити до незвичайних ефектів, таких як тунелювання, яке може спотворювати результати моделювання та

ускладнювати розуміння фізичних основ роботи пристроїв.

Недостатня кількість даних: Напівпровідники - це нові матеріали, які продовжують розвивати та вдосконалювати. Це може призводити до того, що відсутні необхідні дані про їх властивості та характеристики. В результаті ускладнюється процес моделювання та виникає потреба у додаткових дослідженнях.

Для подолання зазначених труднощів використовуються згадані нижче підходи та методи.

Пропонуються нові математичні моделі. Для покращення точності та швидкості моделювання, дослідники розробляють нові математичні моделі, які враховують складну структуру та фізичні властивості напівпровідникових пристроїв.

Використовуються суперкомп'ютери. Для розв'язання складних математичних задач та моделювання великих об'ємів даних, дослідники використовують суперкомп'ютери, що значно прискорює процес моделювання.

Проводяться серії експериментальних досліджень. Для підтвердження результатів моделювання та отримання додаткових даних, дослідники проводять експериментальні дослідження, що дозволяють перевірити адекватність математичних моделей та здійснити їх вдосконалення.

Формуються колективи дослідників. Для розв'язання складних задач, дослідники з різних галузей науки працюють сумісно, використовуючи свої знання та досвід для розв'язання проблеми.

У цілому моделювання напівпровідникових пристроїв є складним завданням та вимагає високої кваліфікації та проведення великих об'ємів наукової роботи. Проте, ці зусилля можуть призвести до нових відкриттів та покращень в технології напівпровідникової електроніки, що, в свою чергу, може відкрити двері до нових можливостей в багатьох галузях, включаючи електроніку, енергетику, медицину, авіацію, оборону та інших.

Моделювання напівпровідникових пристроїв ґрунтується на використанні різних підходів та інструментальних засобів, таких, як аналітичні та чисельні

методи, моделювання на рівні пристроїв та інтегральне моделювання.

Аналітичні методи дозволяють дослідникам отримати аналітичні вирази для фізичних властивостей напівпровідників, таких як енергетичні рівні та характеристики перенесення заряду. Ці методи ґрунтуються на розв'язанні диференціальних рівнянь, які описують поведінку електронів, дірок та дефектів у напівпровідниках. Аналітичні методи дозволяють отримати загальну картину поведінки напівпровідників та їх електронних пристроїв, але вони не дозволяють отримати детальну інформацію про конкретний пристрій або процес.

Чисельні методи, на відміну від аналітичних, дозволяють розв'язувати складні рівняння та моделювати поведінку конкретних пристроїв та процесів. Ці методи ґрунтуються на чисельному розв'язанні рівнянь на комп'ютері та використанні різноманітних алгоритмів, які дозволяють отримати детальну інформацію про поведінку пристроїв та процесів в реальному часі. Чисельні методи зазвичай використовуються для моделювання технологій виготовлення напівпровідникових пристроїв, таких як процеси етапування, дифузії, окислення та іонної імплантації.

Моделювання на рівні пристроїв дозволяє дослідникам отримати більш детальну інформацію про поведінку конкретного пристрою та його взаємодію з іншими елементами системи. Цей підхід базується на моделюванні фізичних процесів в конкретному пристрої, такому як транзистор або діод, з використанням рівнянь та параметрів, що описують його поведінку. Моделювання на рівні пристроїв дозволяє детально вивчити характеристики пристроїв, такі як вольт-амперні, частотні тощо.

Інтегральне моделювання дозволяє дослідникам моделювати поведінку системи напівпровідникових пристроїв, які взаємодіють між собою та з зовнішнім середовищем. Цей підхід базується на моделюванні взаємодії різних пристроїв та елементів системи, таких як джерела живлення, трансформатори та інші елементи. Інтегральне моделювання дозволяє дослідникам оцінити ефективність та надійність системи та визначити потрібні параметри для її

оптимізації.

Однією з основних труднощів при розв'язанні модельних задач напівпровідникової електроніки є велика кількість фізичних процесів, які відбуваються в системі. Це вимагає використання складних математичних методів та чисельних алгоритмів, що може призводити до значного збільшення часу розрахунку та вимагає високих обчислювальних ресурсів.

Крім того, існує проблема валідації моделей, яка полягає в тому, що підтвердження точності моделей зазвичай здійснюється за допомогою експериментальних даних, отриманих на реальних пристроях. Але в процесі розробки нових пристроїв, коли експериментальні дані ще не доступні, моделювання стає основним інструментом для оцінки характеристик пристроїв та їх взаємодії в системі.

Також, однією з труднощів є проблема розробки математичних моделей, які забезпечують точність та адекватність при моделюванні реальних фізичних процесів. Це вимагає глибокого розуміння фізичних процесів, що відбуваються в пристроях та системах, а також високої кваліфікації в області математичного моделювання.

Зауважимо також, що інтеграція різних моделей та алгоритмів в одну систему також є складною задачею, оскільки вимагає вирішення проблеми сумісності та синхронізації різних елементів системи.

РОЗДІЛ 2

ВИКОРИСТАННЯ МЕТОДУ ПРИМЕЖОВИХ ФУНКЦІЙ У МАТЕМАТИЧНОМУ МОДЕЛЮВАННІ ХАРАКТЕРИСТИК ПЛАЗМИ АКТИВНОЇ ОБЛАСТІ P-I-N-СТРУКТУР

2.1. Математична постановка задачі

Математичне моделювання плазмових характеристик активної зони p-i-n-структур включає розв'язання нелінійної системи рівнянь у частинних похідних (PDE), що описують поведінку електронів, іонів та електромагнітних полів у напівпровідниковому матеріалі.

Характерні лінійні розміри об'ємних p-i-n-діодів такі, що виконується співвідношення $R \gg w$. При цьому дифузійно-рекомбінаційні процеси на бічній поверхні діода практично не впливають на накопичення об'ємного заряду в активній області. У зв'язку із цим доцільним є розгляд одновимірної моделі досліджуваної системи.

Попередньо застосовуємо процедуру нормування: $\tilde{X} = \frac{x}{w}$ ($0 < \tilde{x} < 1$), $\tilde{\varphi}(x) = \frac{e\varphi(x)}{k_B T}$, $\tilde{U}(x) = \frac{eU(x)}{k_B T}$, $\tilde{n}(x) = \frac{n(x)}{N_i}$ ($0 \leq \tilde{n}(x) \leq \frac{n_{max}}{N_i}$), $\tilde{p}(x) = \frac{p(x)}{N_i}$ ($0 \leq \tilde{p}(x) \leq \frac{p_{max}}{N_i}$), $\tilde{N}_d(x) = \frac{N_d(x)}{N_i}$, де N_i – стала, визначає концентрацію електронів у власному напівпровіднику, залежить від обраного матеріалу напівпровідника. Система рівнянь (1.1-1.3) із врахуванням вище сказаного подається у вигляді сингулярно-збуреної системи звичайних диференціальних рівнянь (знак “~” надалі для зручності запису опущено):

$$\begin{cases} \mu\varphi'' = -(p - n + N_d), \\ n'' = n'\varphi' + n\varphi'' + A_n n, \\ p'' = -p'\varphi' - p\varphi'' + A_p p. \end{cases} \quad (2.1)$$

В (2.1) використано позначення: $\mu = \frac{\varepsilon\varepsilon_0 kT}{e^2 w^2 N_i}$ (малий параметр $\mu \sim 10^{-6} \div 10^{-8}$), $A_n = \frac{w^2}{D_n \tau_n^*}$, $A_p = \frac{w^2}{D_p \tau_p^*}$.

Граничні умови (1.6)-(1.9) набувають наступного вигляду:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial n}{\partial x} - \gamma_n w n \Big|_{x=0} &= \frac{J}{e D_n} \frac{w}{N_i}, & \frac{\partial p}{\partial x} \Big|_{x=0} &= 0, \\
 \frac{\partial p}{\partial x} - \gamma_p w p \Big|_{x=1} &= -\frac{J}{e D_p} \frac{w}{N_i}, & \frac{\partial n}{\partial z} \Big|_{x=1} &= 0, \\
 \varphi \Big|_{x=0} &= 0, & \varphi \Big|_{x=1} &= U.
 \end{aligned}
 \tag{2.2}$$

2.2. Застосування методу примежових функцій для проведення декомпозиції базової задачі

Активна область р-і-n-діода містить дискретні особливості. Зокрема, в зонах поблизу інжектуючих контактів. Для подолання цієї проблеми можна застосувати метод примежових функцій [5-10]. Він передбачає представлення розв'язку PDE у вигляді суми асимптотичних рядів, один з яких (регулярний) задовольняє систему рівнянь в глибині активної області, та примежових функцій, які визначені на межі області постановки задачі, і забезпечують узгодження розв'язків задачі з граничними умовами. Підстановка запропонованих розв'язків у початкову задачу та виділення подібних членів дозволяє провевсти декомпозицію задачі (початкова задача приводиться до рекурентної послідовність простіших задач – наприклад отримані підзадачі є лінійними).

Процедура застосування методу примежових функцій включає наступні етапи: 1) здійснюється математична постановка задачі на фізичній області з певною геометрією; 2) пропонується розв'язок задачі у вигляді асимптотичних рядів за степенями малого параметра задачі при цьому формується регулярна частина асимптотики та примежові поправки; 3) запропоновані розв'язки підставляють у початкові рівняння і групують члени при одинкових степенях малого параметра; 4) шляхом виконання процедури прирівнювання членів рівняння при однакових степенях отримують рекурентну послідовність задач які забезпечують пошук невідомих функцій з яких побудовані асимптотичні ряди.

Застосуємо описаний алгоритм до задачі (2.1) – (2.2). Враховуючи те, що на структуру розв'язку в основному впливають умови на контактних ділянках (точки околу точок $x=0$, $x=1$), через які здійснюється наповнення і-області

носіями заряду, пропонуємо шукати розв'язок у вигляді наступних асимптотичних рядів [5-10]:

$$\begin{aligned}
\varphi &= \varphi(x, \mu) = \varphi_{(m)}(x, \mu) + \underline{\varphi}_{(m)}(\underline{\xi}, \mu) + \overline{\varphi}_{(m)}(\overline{\xi}, \mu) + R_{\varphi(m)}(x, \mu) = \\
&= \sum_{i=0}^m \mu^i \phi_i(x) + \sum_{i=0}^m \mu^i \underline{\Phi}_i(\underline{\xi}) + \sum_{i=0}^m \mu^i \overline{\Phi}_i(\overline{\xi}) + R_{\varphi(m)}(x, \mu), \\
n &= n(z, \mu) = N_{(m)}(x, \mu) + \underline{N}_{(m)}(\underline{\xi}, \mu) + \overline{N}_{(m)}(\overline{\xi}, \mu) + R_{n(m)}(x, \mu) = \\
&= \sum_{i=0}^m \mu^i n_i(x) + \sum_{i=0}^m \mu^i \underline{N}_i(\underline{\xi}) + \sum_{i=0}^m \mu^i \overline{N}_i(\overline{\xi}) + R_{n(m)}(x, \mu), \\
p &= p(x, \mu) = P_{(m)}(x, \mu) + \underline{P}_{(m)}(\underline{\xi}, \mu) + \overline{P}_{(m)}(\overline{\xi}, \mu) + R_{p(m)}(x, \mu) \\
&= \sum_{i=0}^m \mu^i p_i(x) + \sum_{i=0}^m \mu^i \underline{P}_i(\underline{\xi}) + \sum_{i=0}^m \mu^i \overline{P}_i(\overline{\xi}) + R_{p(m)}(x, \mu),
\end{aligned} \tag{2.3}$$

де $\varphi_{(m)}(x, \mu), N_{(m)}(x, \mu), P_{(m)}(x, \mu)$ - регулярна частина асимптотики; $\underline{\Phi}_{(m)}(\underline{\xi}, \mu)$, $\underline{N}_{(m)}(\underline{\xi}, \mu)$, $\underline{P}_{(m)}(\underline{\xi}, \mu)$, $\overline{\Phi}_{(m)}(\overline{\xi}, \mu)$, $\overline{N}_{(m)}(\overline{\xi}, \mu)$, $\overline{P}_{(m)}(\overline{\xi}, \mu)$ - примежові поправки асимптотики відповідно в околах точок $x=0$ та $x=l$ ($\underline{\xi} = \frac{x}{\sqrt{\mu}}$, $\overline{\xi} = \frac{1-x}{\sqrt{\mu}}$ - відповідні регуляризуючі розтяги); $R_{\varphi(m)}(x, \mu), R_{n(m)}(x, \mu), R_{p(m)}(x, \mu)$ - залишкові члени.

Підставляючи (2.3) в рівняння (2.1) та умови (2.2) та застосувавши стандартну процедуру “прирівнювання” [5-10], формуємо задачі для пошуку членів розкладу. Зокрема, для знаходження головних членів асимптотики ($\varphi_0(x), n_0(x), p_0(x), \underline{\Phi}_0(\underline{\xi}), \underline{N}_0(\underline{\xi}), \underline{P}_0(\underline{\xi}), \overline{\Phi}_0(\overline{\xi}), \overline{N}_0(\overline{\xi}), \overline{P}_0(\overline{\xi})$) маємо:

$$\begin{cases} n_0 = p_0, \\ n_0'' - (n_0 \phi_0')' - A_{n2} n_0 = 0, \\ p_{20}'' + (p_{20} \phi_{20}')' - A_{p2} p_{20} = 0, \end{cases} \tag{2.4}$$

$$\begin{aligned}
n_0' - n_0 \phi_{20}' - 2\gamma_n w n_{20} \Big|_{x=0} &= \frac{wJ}{eD_n N_i}, & -p_{20}' - p_{20} \phi_{20}' \Big|_{x=0} &= 0, \\
-p_{20}' - p_{20} \phi_{20}' - 2\gamma_p w p_{20} \Big|_{x=1} &= \frac{wJ}{eD_p N_i}, & n_2' - n_2 \phi_{20}' \Big|_{x=1} &= 0.
\end{aligned}$$

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 \Phi_{20}}{\partial \underline{\xi}^2} = -(P_{20} - N_{20}), \\ \frac{\partial^2 N_{20}}{\partial \underline{\xi}^2} - \frac{\partial}{\partial \underline{\xi}} \left(N_{20} \frac{\partial \Phi_{20}}{\partial \underline{\xi}} \right) - n_{20}(0) \frac{\partial^2 \Phi_{20}}{\partial \underline{\xi}^2} = 0, \\ \frac{\partial^2 P_{20}}{\partial \underline{\xi}^2} + \frac{\partial}{\partial \underline{\xi}} \left(P_{20} \frac{\partial \Phi_{20}}{\partial \underline{\xi}} \right) + p_{20}(0) \frac{\partial^2 \Phi_{20}}{\partial \underline{\xi}^2} = 0, \end{cases} \tag{2.5}$$

$$\frac{\partial N_{20}}{\partial \underline{\xi}} - N_{20} \frac{\partial \Phi_{20}}{\partial \underline{\xi}} - n_{20}(0) \frac{\partial \Phi_{20}}{\partial \underline{\xi}} \Big|_{\underline{\xi}=0} = 0, \quad \lim_{\underline{\xi} \rightarrow \infty} N_{20}(\underline{\xi}) = 0,$$

$$-\frac{\partial P_{20}}{\partial \xi} - P_{20} \frac{\partial \Phi_{20}}{\partial \xi} - p_{20}(0) \frac{\partial \Phi_{20}}{\partial \xi} \Big|_{\xi=0} = 0, \lim_{\xi \rightarrow \infty} P_{20}(\xi) = 0,$$

$$\Phi_{20} + \underline{\Phi}_{20} \Big|_{x=0} = U_n + \ln(n_2(0) + N_{20}(0)),$$

$$\lim_{\xi \rightarrow \infty} \Phi_{20}(\xi) = \lim_{\xi \rightarrow -\infty} \bar{\Phi}_{20}(\xi), \lim_{\xi \rightarrow \infty} \frac{\partial \Phi_{20}(\xi)}{\partial \xi} = \lim_{\xi \rightarrow -\infty} \frac{\partial \bar{\Phi}_{20}(\xi)}{\partial \xi}.$$

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 \bar{\Phi}_{20}}{\partial \xi_2^2} = -(\bar{P}_{20} - \bar{N}_{20}), \\ \frac{\partial^2 \bar{N}_{20}}{\partial \xi_2^2} - \frac{\partial}{\partial \xi_2} \left(\bar{N}_{20} \frac{\partial \bar{\Phi}_{20}}{\partial \xi_2} \right) - n_2(1) \frac{\partial^2 \bar{\Phi}_{20}}{\partial \xi_2^2} = 0, \\ \frac{\partial^2 \bar{P}_{20}}{\partial \xi_2^2} + \frac{\partial}{\partial \xi_2} \left(\bar{P}_{20} \frac{\partial \bar{\Phi}_{20}}{\partial \xi_2} \right) + p_{20}(1) \frac{\partial^2 \bar{\Phi}_{20}}{\partial \xi_2^2} = 0, \end{cases} \quad (2.6)$$

$$\frac{\partial \bar{N}_{20}}{\partial \xi_2} - \bar{N}_{20} \frac{\partial \bar{\Phi}_{20}}{\partial \xi_2} - n_{20}(1) \frac{\partial \bar{\Phi}_{20}}{\partial \xi_2} \Big|_{\xi_2=0} = 0, \lim_{\xi_2 \rightarrow -\infty} \bar{N}_{20}(\xi_2) = 0,$$

$$-\frac{\partial \bar{P}_{20}}{\partial \xi_2} - \bar{P}_{20} \frac{\partial \bar{\Phi}_{20}}{\partial \xi_2} - p_{20}(1) \frac{\partial \bar{\Phi}_{20}}{\partial \xi_2} \Big|_{\xi_2=0} = 0, \lim_{\xi_2 \rightarrow -\infty} \bar{P}_{20}(\xi_2) = 0,$$

$$\varphi_{20} + \bar{\Phi}_{20} \Big|_{x=1} = U - U_p + \ln(p_{20}(1) + \bar{P}_{20}(1)),$$

$$\lim_{\xi_2 \rightarrow \infty} \Phi_{20}(\xi_2) = \lim_{\xi_2 \rightarrow -\infty} \bar{\Phi}_{20}(\xi_2), \lim_{\xi_2 \rightarrow \infty} \frac{\partial \Phi_{20}(\xi_2)}{\partial \xi_2} = \lim_{\xi_2 \rightarrow -\infty} \frac{\partial \bar{\Phi}_{20}(\xi_2)}{\partial \xi_2}.$$

Умови на нескінченності в задачах (2.5), (2.6) формуємо так, щоб відповідні функції мали властивості примежових.

Шляхом виключення із системи рівнянь (2.4) функції потенціалу отримуємо еквівалентне системі лінійне диференціальне рівняння виду:

$$\frac{d^2 n_0}{dx^2} - \frac{1}{2}(A_n + A_p)n_0 = 0. \quad (2.7)$$

Загальний розв'язок рівняння (2.7) подаємо наступним чином:

$$p_0(x) = n_0(x) = C_1 \exp\left(-\frac{x}{L}\right) + C_2 \exp\left(\frac{x}{L}\right), \quad \frac{1}{L^2} = \frac{1}{2}(A_n + A_p). \quad (2.8)$$

Знайдемо загальні розв'язки системи рівнянь (2.5) (аналогічно розглядається система рівнянь (2.6) за схема яка наведена у роботі [10]).

Скористаємось заміною $N(\xi) = \underline{N}_0(\xi) + n_0(0)$, $P(\xi) = \underline{P}_0(\xi) + p_0(0)$. Задача (2.5) набуває наступного вигляду:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial^2 \Phi_{20}}{\partial \xi_2^2} = -(\underline{P} - \underline{N}), \\ \frac{\partial^2 \underline{N}}{\partial \xi_2^2} - \frac{\partial}{\partial \xi_2} \left(\underline{N} \frac{\partial \Phi_{20}}{\partial \xi_2} \right) = 0, \\ \frac{\partial^2 \underline{P}}{\partial \xi_2^2} + \frac{\partial}{\partial \xi_2} \left(\underline{P} \frac{\partial \Phi_{20}}{\partial \xi_2} \right) = 0, \end{array} \right. \quad (2.9)$$

$$\left. \frac{\partial \underline{N}}{\partial \xi_2} - \underline{N} \frac{\partial \Phi_{20}}{\partial \xi_2} \right|_{\xi_2=0} = 0, \quad \lim_{\xi_2 \rightarrow \infty} \underline{N}(\xi_2) = n_0(0), \quad \left. -\frac{\partial \underline{P}}{\partial \xi_2} - \underline{P} \frac{\partial \Phi_{20}}{\partial \xi_2} \right|_{\xi_2=0} = 0, \quad \lim_{\xi_2 \rightarrow \infty} \underline{P}(\xi_2) = p_0(0),$$

$$\lim_{\xi_2 \rightarrow \infty} \Phi_{20}(\xi_2) = \lim_{\xi_2 \rightarrow -\infty} \bar{\Phi}_{20}(\bar{\xi}_2), \quad \lim_{\xi_2 \rightarrow \infty} \frac{\partial \Phi_{20}(\xi_2)}{\partial \xi_2} = \lim_{\xi_2 \rightarrow -\infty} \frac{\partial \bar{\Phi}_{20}(\bar{\xi}_2)}{\partial \bar{\xi}_2}.$$

Введемо заміни $V = \underline{P}_0 - \underline{N}_0$, $W = \underline{P}_0 + \underline{N}_0$. Тоді (2.9) набуває вигляду:

$$\left\{ \begin{array}{l} \Phi_0'' = -V, \\ W'' + (V \Phi_0')' = 0, \\ V'' + (W \Phi_0')' = 0. \end{array} \right.$$

Дану систему рівнянь приводимо до системи рівнянь першого порядку:

$$\left\{ \begin{array}{l} \Phi_0' = -\Pi, \\ \Pi' = V, \\ W' + (V\Pi) = C_W, \\ V' + (W\Pi) = C_V, \end{array} \right. \quad (2.10)$$

де C_W, C_V – сталі інтегрування.

Система рівнянь (2.10) доповнюється граничними умовами на межі $\xi = 0$ і при $\xi \rightarrow \infty$. Граничні умови записуємо на основі співвідношень (2.3) і (2.4) у вигляді:

$$\left. \frac{dV}{d\xi} \right|_{\xi=0} = 0, \quad \left. \frac{dW}{d\xi} \right|_{\xi=0} = 0, \quad (2.11)$$

$$\lim_{\xi \rightarrow \infty} W(\xi) = 2n_0(0), \quad \lim_{\xi \rightarrow \infty} V(\xi) = 0.$$

Для встановлення характеру поведінки функції $\Pi(\xi)$ скористаємось її фізичним змістом. Згідно (2.10) ця функція має зміст напруженості електричного поля, що створене примежовими зарядами. На межі області ($x =$

0) значення потенціалу сталє, тому $\left. \frac{d\Phi'_0}{d\underline{\xi}} \right|_{\underline{\xi}=0} = \Pi|_{\underline{\xi}=0} = 0$. У глибині активної області (при $\underline{\xi} \rightarrow \infty$) значення напруженості поля сталє ($\lim_{\underline{\xi} \rightarrow \infty} \Pi = \Pi_\infty$).

Здійснивши підстановку V з другого рівняння системи (2.10) у третє, виконавши інтегрування і скориставшись граничними умовами (2.11), отримуємо:

$$W = \frac{\Pi^2}{2} - \frac{\Pi_\infty^2}{2} + 2n_0(0), \quad C_W = 0. \quad (2.12)$$

З третього і четвертого рівнянь системи (2.10) слідує характер зв'язку між функціями $V(\underline{\xi})$, $W(\underline{\xi})$: $V^2 = W^2 \Rightarrow V = \pm W$. Із фізичних міркувань та із врахуванням способу введення цих функцій в останньому виразі обирається знак “-”. Остаточно:

$$V = \sqrt{\left(\frac{\Pi^2}{2} - \frac{\Pi_\infty^2}{2}\right) \left(\frac{\Pi^2}{2} - \frac{\Pi_\infty^2}{2} + 4n_0(0)\right)}. \quad (2.13)$$

Підстановка (2.13) у друге рівняння системи (2.5) дозволяє отримати диференціальне рівняння для визначення функції $\Pi(\underline{\xi})$:

$$\Pi' = \sqrt{\left(\frac{\Pi^2}{2} - \frac{\Pi_\infty^2}{2}\right) \left(\frac{\Pi^2}{2} - \frac{\Pi_\infty^2}{2} + 4n_0(0)\right)}. \quad (2.15)$$

Рівняння (2.15) доповнюємо граничними умовами виду $\lim_{\underline{\xi} \rightarrow \infty} \Pi(\underline{\xi}) = \Pi_\infty$.

Аналіз диференціального рівняння (2.15) дозволяє зробити висновок проте, що на проміжку інтегрування це рівняння міняє тип. Очевидно що дане не інтегрується у квадратурах.

Лише при $n_0(0) \rightarrow 0$ можна знайти аналітичний розв'язок відповідної задачі Коші у вигляді:

$$\Pi(\underline{\xi}) = -\Pi_\infty \frac{\operatorname{sh}\left(\frac{\Pi_\infty \underline{\xi}}{2}\right)}{\operatorname{ch}\left(\frac{\Pi_\infty \underline{\xi}}{2}\right)}. \quad (2.16)$$

У цьому випадку примежові концентрації носіїв заряду можна отримати у наступному вигляді:

$$\underline{P}_0 = 0, \quad (2.17)$$

$$\underline{N_0}(\underline{\xi}) = \frac{\Pi_\infty^2}{2} \left(1 - th^2 \left(\frac{\Pi_\infty \underline{\xi}}{2} \right) \right).$$

Значення сталої інтегрування Π_∞ знаходимо з умови:

$$\int_0^1 \left(th \left(\frac{\Pi_\infty x}{2\sqrt{\mu}} \right) + th \left(\frac{\Pi_\infty(1-x)}{2\sqrt{\mu}} \right) \right) dx = \frac{U}{\Pi_\infty}.$$

Аналогічно до [10] можна знайти наступні поправки (регулярні та примежові) до одержаної головної частини розв'язку та оцінити залишкові члени.

РОЗДІЛ 3

ІНСТРУМЕНТАЛЬНІ ЗАСОБИ КОМП'ЮТЕРНОГО МОДЕЛЮВАННЯ ЗАДАЧ НАПІВПРОВІДНИКОВОЇ ЕЛЕКТРОНІКИ

3.1. Математичні пакети

Математичні пакети є важливим інструментом для комп'ютерного моделювання в галузі напівпровідникової електроніки. Ці пакети надають необхідні математичні функції та інші відповідні інструменти для виконання складних чисельних обчислень, необхідних для моделювання поведінки напівпровідникових пристроїв.

Використання математичних пакетів у моделюванні напівпровідникової електроніки дозволяє розв'язувати різноманітні математичні задачі, такі, наприклад, як крайові задачі для звичайних диференціальних рівнянь, рівнянь в частинних похідних, задачі Коші, проводити статистичне моделювання тощо. Математичні пакети також реалізують чисельні методи розв'язання багатьох математичних задач, такі, наприклад, як методи скінченних різниць, скінченних елементів, Монте-Карло.

Один з таких математичних пакетів, що знаходить широке застосування в моделюванні напівпровідникової електроніки, - Maple. Ця програма є комерційним програмним забезпеченням для символічних та чисельних обчислень, яке має потужні можливості у сфері математики, фізики, інженерії та інших галузях науки [11].

Один з ключових інструментів Maple, що стосується розв'язання диференціальних рівнянь, - бібліотека `dsolve`. Вона включає в себе набір функцій, які дозволяють символічно та чисельно розв'язувати різноманітні диференціальні рівняння, підтримує розв'язання лінійних та нелінійних диференціальних рівнянь, включаючи звичайні та диференціальні рівняння в частинних похідних. Бібліотека `dsolve` дозволяє знайти аналітичні розв'язки, чисельні наближення та візуалізацію результатів.

Окрім бібліотеки `dsolve`, Maple має інші корисні бібліотеки, які

допомагають у моделюванні напівпровідникових пристроїв. Наприклад, бібліотека MapleSim надає інструменти для створення фізичних моделей та симуляції систем з використанням диференціальних рівнянь. Вона дозволяє моделювати різні аспекти поведінки напівпровідникових пристроїв, такі як електричний струм, теплові потоки, механічні впливи тощо.

3.2. Спеціалізовані програми

Згадані вище пакети математичних програм є досить універсальними. З розвитком відповідних інструментальних засобів розв'язання модельних задач з'явилося ряд вузько спеціалізованих програм, яка призначені для розробки моделей у області напівпровідникової електроніки.

Одним із прикладів спеціалізованої програми для моделювання напівпровідникової електроніки є пакет TCAD від Silvaco. TCAD (технологія автоматизованого проектування) — це комплексний програмний пакет, який дозволяє користувачам моделювати та симулювати поведінку напівпровідникових пристроїв і процесів на рівні пристрою, схеми та системи. Пакет включає кілька модулів, які призначені для вирішення проблем моделювання на рівні процесів, пристроїв, та схем [12].

Іншою спеціалізованою програмою для симуляції пристроїв напівпровідникової електроніки є COMSOL Multiphysics. Програма надає комплексний набір інструментів для математичного моделювання широкого діапазону фізичних явищ; дифузійно-дрейфових процесів, термічних тощо [13].

Ці спеціалізовані програми пропонують розширені функції та можливості, адаптовані до унікальних вимог моделювання напівпровідникової електроніки. Вони дозволяють дослідникам та інженерам точно моделювати, імітувати, оптимізувати складні напівпровідникові пристрої та системи, що в результаті приводить до появи більш досконалих та ефективних напівпровідникових технологій.

SPICE (Simulation Program with Integrated Circuit Emphasis) - це програмна система для моделювання і аналізу електронних схем [14]. Вона була

розроблена спеціально для симуляції і проектування інтегральних схем (Integrated Circuits, ICs). SPICE надає інженерам і дослідникам засоби для визначення поведінки і властивостей електронних пристроїв і логічних схем перед їх фізичною реалізацією.

SPICE використовує математичні моделі для опису поведінки різних компонент інтегральних схеми. Ці моделі базуються на фізичних законах і експериментальних даних. SPICE підтримує різні типи моделей, включаючи моделі високого рівня, які надають загальний опис характеристик компонент схеми, і детальніші моделі, які враховують внутрішню структуру компонента.

Окрім моделювання елементів схеми, SPICE дозволяє проводити симуляцію різних видів аналізу, таких як статичний аналіз, аналіз в часовій області, аналіз в частотній області, аналіз параметрів та багато інших. Такі моделі дозволяють оцінити роботу схеми в різних умовах і визначити її ефективність, стабільність та інші характеристики.

Таким чином, використання спеціалізованих програм, таких як пакет TCAD від Silvaco, COMSOL Multiphysics, SPICE є важливим для комп'ютерного моделювання в напівпровідниковій електроніці. Ці інструменти забезпечують розширені функції та можливості, адаптовані до унікальних вимог напівпровідникової промисловості, і дозволяють точне моделювання та імітацію складних напівпровідникових пристроїв і систем.

РОЗДІЛ 4

РОЗРОБКА ЧИСЕЛЬНИХ АЛГОРИТМІВ МОДЕЛЮВАННЯ ХАРАКТЕРИСТИК ПЛАЗМИ АКТИВНОЇ ОБЛАСТІ P-I-N-СТРУКТУР

4.1. Реалізація модельних алгоритмів

У процесі розв'язання задачі (2.1)-(2.2) приходимо до задачі (2.15), яка дає інформацію про поведінку розподілів носіїв заряду у зонах контактних областей та про розподіл електростатичного поля в активній області.

Оскільки значення шуканої функції $\Pi(x)$ на певній підобласті відрізка інтегрування комплексні, то доцільно шукати невідому функцію у вигляді $\Pi(x) = \Pi_{re}(x) + i\Pi_{im}(x)$.

Після підстановки пропонованого вигляду шуканої функції у початкове рівняння отримаємо:

$$d(\Pi_{re}(x) + i\Pi_{im}(x)) = \frac{1}{2} \sqrt{\left((\Pi_{re}(x) + i\Pi_{im}(x))^2 - \Pi_{\infty}^2 \right) \left((\Pi_{re}(x) + i\Pi_{im}(x))^2 - \Pi_{\infty}^2 + 8n_0(0) \right)} dx = \quad (4.1)$$

$$= \sqrt{\left(\Pi_{re}^2 - \Pi_{im}^2 - \Pi_{\infty}^2 \right)^2 - (2\Pi_{re}\Pi_{im})^2 + 8n_0(0) \left(\Pi_{re}^2 - \Pi_{im}^2 - \Pi_{\infty}^2 \right) + i4\Pi_{re}\Pi_{im} \left(\Pi_{re}^2 - \Pi_{im}^2 - \Pi_{\infty}^2 + 4n_0(0) \right)} dx.$$

Введемо позначення:

$$A = \left(\Pi_{re}^2 - \Pi_{im}^2 - \Pi_{\infty}^2 \right)^2 - (2\Pi_{re}\Pi_{im})^2 + 8n_0(0) \left(\Pi_{re}^2 - \Pi_{im}^2 - \Pi_{\infty}^2 \right), \quad (4.2)$$

$$B = 4\Pi_{re}\Pi_{im} \left(\Pi_{re}^2 - \Pi_{im}^2 - \Pi_{\infty}^2 + 4n_0(0) \right). \quad (4.3)$$

Праву частину диференціального рівняння перетворимо згідно наступного правила:

$$\sqrt{A + iB} = \sqrt{A^2 + B^2} \left(\cos \frac{\varphi + 2\pi k}{2} + i \sin \frac{\varphi + 2\pi k}{2} \right), \quad k=0,1, \quad \varphi = \arctg \frac{B}{A}. \quad (4.4)$$

У результаті приходимо до системи диференціальних рівнянь на множині дійсних чисел виду:

$$\begin{cases} d\Pi_{re} = \sqrt{A^2 + B^2} \cos \frac{\arctg \frac{B}{A}}{2} dx \\ d\Pi_{im} = \sqrt{A^2 + B^2} \sin \frac{\arctg \frac{B}{A}}{2} dx \end{cases} \quad (4.5)$$

Система рівнянь доповнюється початковими умовами виду:

$$P_{re}(\infty) = P_{\infty}, P_{im}(\infty) = 0.$$

В результаті аналізу наявних інструментальних засобів моделювання приходимо до висновку, що інструменти Maple є найбільш зручними для розв'язання задачі (4.5) та представлення результатів моделювання. Нижче наведений код реалізації математичної моделі (4.5) в Maple:

```
restart;
Digits := 18;
with(plots);
IN := 5;
n_0 := 1;
A := x -> (RE(x)^2 - IM(x)^2 - IN^2)^2 - 4*RE(x)^2*IM(x)^2 +
8*n_0*(RE(x)^2 - IM(x)^2 - IN^2);
B := x -> 4*RE(x)*IM(x)*(RE(x)^2 - IM(x)^2 - IN^2 + 4*n_0)
sys := diff(RE(x), x) = 1/2*sqrt(A(x)^2 + B(x)^2)*cos(arctan(B(x)/A(x))/2),
diff(IM(x), x) = 1/2*sqrt(A(x)^2 + B(x)^2)*sin(arctan(B(x)/A(x))/2)
con := RE(0) = IN, IM(0) = 0
graf := dsolve({con, sys}, {IM(x), RE(x)}, type = numeric, range = 0 .. 100);
odeplot(graf, [x, RE(x)], 0 .. 200);
```

Функція `dsolve()` містить параметр, який дає вказівку на використання чисельних методів для розв'язання системи диференціальних рівнянь. В результаті виконання коду будується графік, який демонструє залежність дійсної і уявної частин шуканої функції змінної x . За необхідності можна змінити параметри стандартних функцій Maple `odeplot()`, `dsolve()`.

Під час реалізації даного коду виникають проблеми, що пов'язані з необхідністю обробки наближених до нуля чисел. Дана проблема може бути пов'язано з обмеженими обчислювальними ресурсами, недостатньою точністю представлення чисел з плаваючою комою і тощо.

Тому було вирішено змінити засіб реалізації алгоритму. З метою відслідковування поведінки функції на кожному з обчислювальних етапів був реалізований метод Рунге-Кутти 4-го порядку мовою програмування C++.

Наведений код реалізує алгоритм Рунге-Кутти четвертого порядку для чисельного розв'язування системи диференціальних рівнянь:

```
#include <iostream>
#include <fstream>
#include <vector>
#include <string>
#include <cmath>
#include <time.h>
using namespace std;
// declare functions
// dx function
double n_0 = 0.01;
int IN1 = 5;
double A(double y1, double y2) {
    return (y1*y1 - y2*y2 - IN1*IN1) * (y1 * y1 - y2 * y2 - IN1 * IN1) - 4 * (y1 *
y2)* (y1 * y2) + 8.0 * n_0 * (y1 * y1 - y2*2 - IN1* IN1);
}
double B(double y1, double y2) {
    return 4.0 * y1 * y2 * (y1*y1 - y2* y2 - IN1*IN1 + 4.0 * n_0);
}
static double dx(double y1, double y2)
{
    double A1 = A(y1, y2);
    double B1 = B(y1, y2);
    double atan_term = atan(B1 / A1);
    double cos_term = cos(atan_term / 2);
    return -0.5 * sqrt(A1*A1 + B1*B1) * cos_term;
}
static double dv(double y1, double y2)
{
```

```

double A1 = A(y1, y2);
double B1 = B(y1, y2);
double atan_term = atan(B1 / A1);
double sin_term = sin(atan_term / 2);
return -0.5 * sqrt(A1 * A1 + B1 * B1) * sin_term;
}
//Runge Kutta 4th Order Function
void rk4(double x, double v, double h, ofstream& outfile)
{
    double k1, k2, k3, k4, l1, l2, l3, l4;
    for (double i = 2; i >= 0; i = i + h)
    {
        // k and l values
        k1 = dx(x, v);
        l1 = dv(x, v);
        k2 = dx(x + k1 * h / 2, v + l1 * h / 2);
        l2 = dv(x + k1 * h / 2, v + l1 * h / 2);
        k3 = dx(x + k2 * h / 2, v + l2 * h / 2);
        l3 = dv(x + k2 * h / 2, v + l2 * h / 2);
        k4 = dx(x + k3 * h, v + l3 * h);
        l4 = dv(x + k3 * h, v + l3 * h);
        // Outfile
        outfile << "\t" << i << "\t" << x << "\t" << v << endl;
        // x value
        x = x + h / 6.0 * (k1 + 2 * k2 + 2 * k3 + k4);
        // v value
        v = v + h / 6.0 * (l1 + 2 * l2 + 2 * l3 + l4);
    }
}
int main()

```

```

{

    clock_t t1, t2; // timer begin
    t1 = clock();
    double h = -0.05;
    string filename;
    int i = 0;
    // initial conditions
    double x = 5;
    double v = -0.5;
    cout << "Enter the name of the output file" << endl;
    cin >> filename;
    cout << pow(5, 2);
    ofstream outfile;
    outfile.open(filename.c_str());
    rk4(x, v, h, outfile);
    outfile.close();
    t2 = clock();
    float diff = ((float)t2 - (float)t1);
    float seconds = diff / CLOCKS_PER_SEC;
    cout << seconds << endl;
    system("PAUSE");
    return 0;
}

```

Результати виконання програми записуються у файл вказаний користувачем.

Також, для кращої візуалізації результатів було розроблено код на мові програмування python. Цей код дає можливість вивести результати і показати графічне відображення, програма зчитує дані з консолі а саме $IN1=5$, $n_0=0$.

$h=0.005$, $x: 0$, $v: 0$ значення який були введені відповідно:

```
import math

import matplotlib.pyplot as plt

def A(y1, y2, IN1, n_0):

    return math.pow(math.pow(y1, 2) - math.pow(y2, 2) - math.pow(IN1, 2), 2)
- 4 * math.pow(y1 * y2, 2) + 8.0 * n_0 * (math.pow(y1, 2) - math.pow(y2, 2) -
math.pow(IN1, 2))

def B(y1, y2, IN1, n_0):

    return 4.0 * y1 * y2 * (math.pow(y1, 2) - math.pow(y2, 2) - math.pow(IN1,
2) + 4.0 * n_0)

def dx(y1, y2, IN1, n_0):

    A1 = A(y1, y2, IN1, n_0)

    B1 = B(y1, y2, IN1, n_0)

    atan_term = math.atan(B1 / A1)

    cos_term = math.cos(atan_term / 2)

    return 0.5 * math.sqrt(math.pow(A1, 2) + math.pow(B1, 2)) * cos_term

def dv(y1, y2, IN1, n_0):

    A1 = A(y1, y2, IN1, n_0)

    B1 = B(y1, y2, IN1, n_0)

    atan_term = math.atan(B1 / A1)

    sin_term = math.sin(atan_term / 2)
```

```

return 0.5 * math.sqrt(math.pow(A1, 2) + math.pow(B1, 2)) * sin_term

def rk4(x, v, h, IN1, n_0, data):

    k1, k2, k3, k4, l1, l2, l3, l4 = 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0

    for i in range(50):

        k1 = dx(x, v, IN1, n_0)

        l1 = dv(x, v, IN1, n_0)

        k2 = dx(x + k1 * h / 2, v + l1 * h / 2, IN1, n_0)

        l2 = dv(x + k1 * h / 2, v + l1 * h / 2, IN1, n_0)

        k3 = dx(x + k2 * h / 2, v + l2 * h / 2, IN1, n_0)

        l3 = dv(x + k2 * h / 2, v + l2 * h / 2, IN1, n_0)

        k4 = dx(x + k3 * h, v + l3 * h, IN1, n_0)

        l4 = dv(x + k3 * h, v + l3 * h, IN1, n_0)

        data.append((i, x, v))

        x = x + h / 6.0 * (k1 + 2 * k2 + 2 * k3 + k4)

        v = v + h / 6.0 * (l1 + 2 * l2 + 2 * l3 + l4)

def main():

    filename = input("Enter the name of the output file: ")

    k = int(input("Enter the number of sets of input data: "))

    all_data = []

    for i in range(k):

```

```
IN1 = float(input("Enter the value of IN1: "))

n_0 = float(input("Enter the value of n_0: "))

h = float(input("Enter the value of h: "))

x = float(input("Enter the value of x: "))

v = float(input("Enter the value of v: "))

data = []

rk4(x, v, h, IN1, n_0, data)

all_data.append(data)

plt.figure()

for data in all_data:

    iterations = [d[0] for d in data]

    x_values = [d[1] for d in data]

    v_values = [d[2] for d in data]

    plt.plot(iterations, x_values, label='x')

    plt.plot(iterations, v_values, label='v')

plt.xlabel('Iteration')

plt.ylabel('Value')

plt.title('RK4 Results')

plt.legend()

plt.show()
```

```
if __name__ == '__main__':
    main()
```

4.2. Аналіз результатів моделювання

Застосування методу примеживих поправок дозволяє знайти головні члени регулярної та примежових частин асимптотичних розв'язків крайової задачі (2.1), (2.2). Ці члени відіграють головну роль у описі розподілів концентрацій носіїв заряду та потенціалу в активній області р-і-п-структур. Цей висновок підтверджується у тому числі результатами експериментальних досліджень (рис. 4.1) [15].

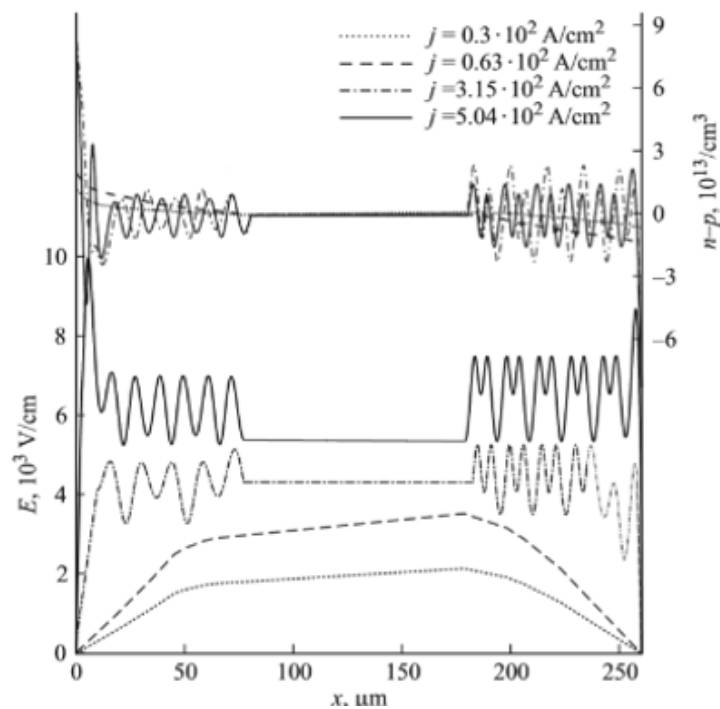


Рис. 4.1. Розподіли напруженості електростатичного поля в активній області р-і-п-структури (ліва шкала) та концентрацій носіїв заряду (права шкала) при різних значеннях інжектуючих струмів.

Зокрема, при низькому рівні інжекції носіїв заряду (при виконанні умови $N_0(\xi) \gg n_0(0)$) спостерігається кореляція експериментальних даних і отриманих модельних результатів (рис. 4.2, рис. 4.3). В експериментах використано наступні значення сталих: $N_i = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, $T = 300^\circ \text{ K}$, $k = 1,38 \cdot 10^{23} \text{ Дж/К}$,

$J = 0,4 \text{ mA/cm}^2$, $U = 5 \text{ мВ}$, $H = 30 \text{ мкм}$, $D_n = 30 \text{ см}^2/\text{с}$, $D_p = 6 \text{ см}^2/\text{с}$, $\tau_n^* = 20 \text{ мкс}$, $\tau_p^* = 25 \text{ мкс}$.

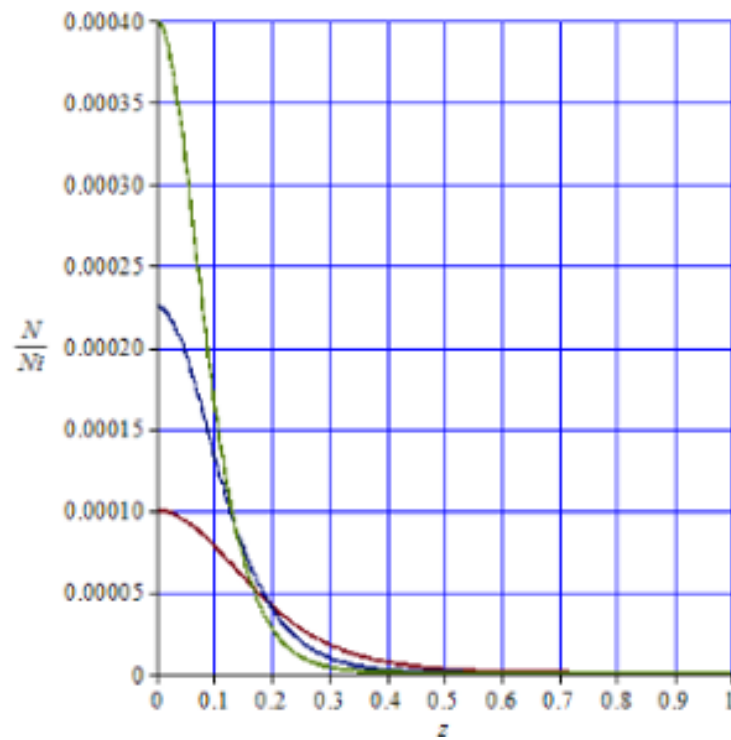


Рис. 4.2. Залежність примежевої концентрації електронів від координати при різних відносно напругах на контактах

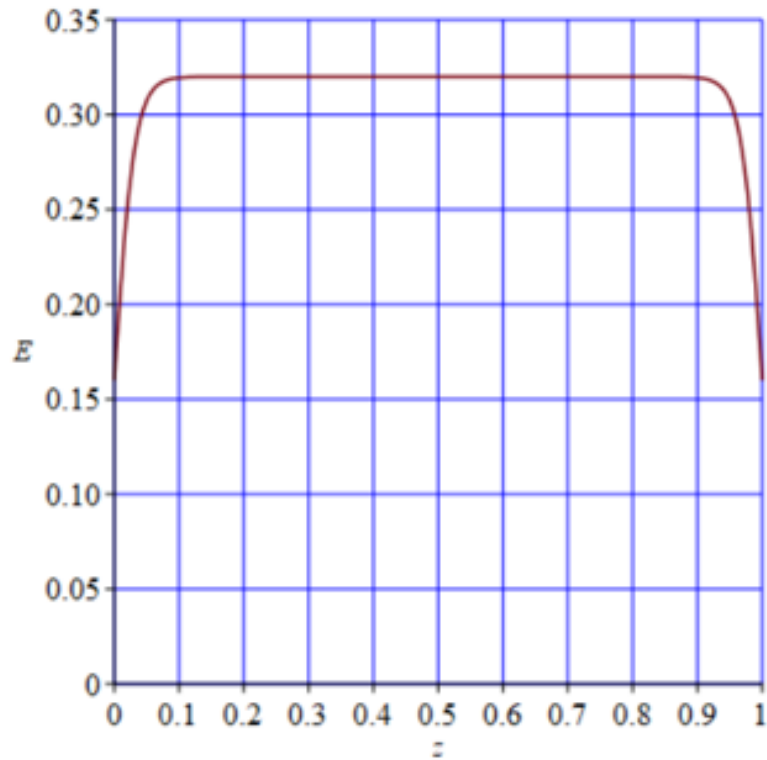


Рис. 4.3. Залежність поля від координати

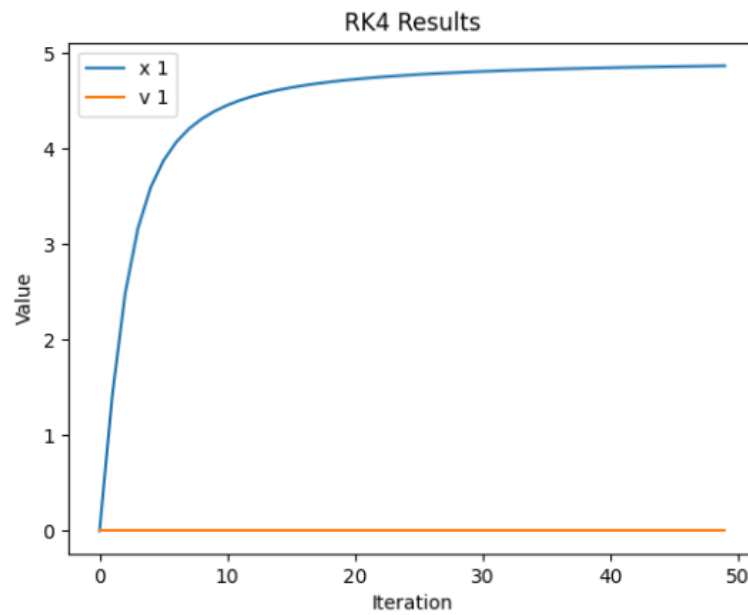


Рис. 4.4. Візуалізація результатів в середовищі розробки python

ВИСНОВКИ

У процесі виконання досліджень зібрано і проаналізовано інформацію по постановці та методах розв'язання крайових задач для сингулярно-збурених нелінійних систем диференціальних рівнянь напівпровідникової електроніки. Проведено декомпозицію початкової задачі моделювання процесів протікання струму в активній області напівпровідникових р-і-n-діодів і отримано еквівалентну їй рекурентну послідовність лінійних крайових задач. Реалізовані алгоритми чисельного розв'язання крайових задач для пошуку примежових поправок інструментальними засобами Maple і C++. Проведено серію машинних експериментів.

Метод примежових функцій має кілька переваг перед іншими методами розв'язування відповідних крайових задач. По-перше, він забезпечує можливість пошуку розв'язку задачі без необхідності дискретизації фізичної області задачі. По-друге, метод є порівняно мало ресурсозатратним за рахунок розбиття початкової складної задачі на простіші.

У процесі виконання завдань дослідження знайдено нульові члени регулярної та примежових частин асимптотичного розв'язку. Показано, що примежові концентрації носіїв заряду відіграють ключову роль у формуванні електростатичного поля в активній області плазмових діодів (р-і-n-діодів).

Метод примежових поправок є одним із ефективних способів аналізу складних систем. Він дозволяє вирішувати, зокрема, складні проблеми теорії плазми, відкриваючи нові шляхи дослідження. Ймовірно цей метод і надалі відіграватиме важливу роль у розробці нових плазмових технологій майбутнього.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Sze S. Physics of Semiconductor Devices / S. Sze, K. Kwok. – New York: Wiley-Interscience, 2006. – 815 p.
2. Адирович Э. И., Карагеоргий-Алкалаев П. М., Лейдерман А. Ю. Токи двойной инжекции в полупроводниках. Под ред. Гальперина. – М.: Советское радио, 1978. – 320 с.
3. Бонч-Бруевич В. Л. Физика полупроводников / В. Л. Бонч-Бруевич, С. Г. Калашников. – М.: Наука, 1990. – 685 с.
4. Надшвидкодiючі прилади електронiки: навчальний посiбник / В. О. Москалюк, В. І. Тимофєєв, А. В. Федяй. – К. : НТУУ «КПІ», 2014. – 528 с. – Бiблiогр. с. 497–527. – 300 пр.
5. Вишик М.И. Регулярное вырождение и пограничный слой для линейных дифференциальных уравнений с малым параметром / М.И. Вишик, Л.А. Люстерник // УМН. – 1957. – т.12. – №5. – С. 3-122.
6. Васильева А.Б. Асимптотические методы в теории сингулярных возмущений / А.Б. Васильева, В.Ф. Бутузов. – М.: Высш. шк., 1990. – 208 с.
7. Бомба А.Я. Методи теорiї збурень прогнозування процесiв тепломасоперенесення в пористих та мiкропористих середовищах / А.Я. Бомба, І.М. Присяжнюк, О.В. Присяжнюк. – Рiвне: О.Зень, 2017. – 291 с.
8. Бомба А.Я. Про асимптотичний метод наближеного розв'язання однієї задачі масопереносу при фільтрації в пористому середовищі / А.Я. Бомба // Український математичний журнал. – 1982. – т.34. - № 4. – С.37-40.
9. Smith D.R. Singular-Perturbation Theory. An Introduction with Applications / D.R. Smith. – Cambridge: Cambridge Univ. Press, 1985. – 520 p.
10. Бомба А.Я. Моделювання розподілу носіїв заряду в активній області р-і-n-структур методами теорії збурень /А.Я. Бомба, І.П. Мороз// Вісник Національного університету водного господарства та природокористування. Серія: Технічні науки-Рiвне – Вип1(97) – 2022 – С. 291-306.
11. Zhaldak M. I. Kompiuter na urokakh heometrii [Computer at the lessons of geometry] / M. I. Zhaldak, O.V. Vitiuk. – K. : DINIT, 2004. – 154 s.

12. Методичні вказівки до виконання лабораторних робіт з дисципліни “Електронні прилади” для студентів напряму підготовки 6.050902 «Радіоелектронні апарати» [Текст] / Уклад.: Є. В. Короткий, С. О. Редько. – К.: КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2017 р. – 164 с.
13. Моделювання пристроїв МСТ: Комп’ютерний практикум [Електронний ресурс] : навч. посіб. для студ. спеціальності 172 «Телекомунікації та радіотехніка» / КПІ ім. Ігоря Сікорського ; уклад.: С. М. Перегудов. – Електронні текстові дані (1 файл: 3,38 Мбайт). – Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2021. – 78 с.
14. Доля П. Г. Основи моделювання в COMSOL Multiphysics // Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна, факультет математики і інформатики кафедра теоретичної і прикладної інформатики 2019 р. – С. 167.
15. Маринець В.В., Рего В.Л., Маринець К.В. Теорія крайових задач для звичайних диференціальних рівнянь: Навчальний посібник. – Ужгород: Вид-во УжНУ «Говерла», 2013. – 196 с.

ДОДАТКИ

Додаток А

