Bollettino
Unione Matematica Italiana

Sezione A – La Matematica nella Società e nella Cultura

Maria Rosaria Russo

Un problema di frontiera libera nel campo dei semiconduttori

Bollettino dell'Unione Matematica Italiana, Serie 8, Vol. **6-A**—*La Matematica nella Società e nella Cultura* (2003), n.2, p. 315–318.

Unione Matematica Italiana

<http://www.bdim.eu/item?id=BUMI_2003_8_6A_2_315_0>

Bollettino dell'Unione Matematica Italiana, Unione Matematica Italiana, 2003.

Bollettino U. M. I.
La Matematica nella Società e nella Cultura
Serie VIII, Vol. VI-A, Agosto 2003, 315-318

Un problema di frontiera libera nel campo dei semiconduttori.

MARIA ROSARIA RUSSO

1. – Introduzione.

La modellizzazione dei dispositivi a semiconduttore copre una vasta gamma di campi nella fisica dello stato solido, nella matematica applicata e computazionale, ed è diventata in pratica un'area di ricerca interdisciplinare. L'interesse per i semiconduttori cominciò nei primi anni '50, quando Van Roosbroek formulò le equazioni fondamentali che descrivevano i semiconduttori, cioè un sistema nonlineare di equazioni differenziali alle derivate parziali che descriveva la distribuzione del potenziale, la concentrazione di cariche e il flusso di corrente in un arbitrario dispositivo a semiconduttore. Inizialmente venivano usati modelli monodimensionali molto semplificati, per facilitarne il trattamento analitico e comprendere le caratteristiche dei dispositivi. Successivamente la tendenza verso la miniaturizzazione dei dispositivi, dovuta alla crescente richiesta sia di dispositivi a basso consumo che di calcolatori veloci e con grande memoria, ha reso obsoleti sia i modelli semplificati che le tecniche analitiche. A tal punto l'enfasi si è spostata verso le tecniche di simulazione numerica, cioè la soluzione computazionale delle equazioni che regolano i dispositivi a semiconduttore, basata su metodi di discretizzazione numerica. Il primo a suggerire tale approccio fù Gummel (1964); divenne subito evidente però che i metodi e la teoria standard delle tecniche di discretizzazione erano inappropriati poichè richiedevano una gran quantità di risorse di calcolo per fornire risultati accurati. La ragione principale di ciò dipende dal fatto che le equazioni del modello sono *stiff*, cioè si ha un sistema di equazioni differenziali che descrive un sistema fisico caratterizzato da costanti molto differenti tra loro in ordine di grandezza. Tale problema fù aggirato da Gummel che sviluppo un tipo di discretizzazione non standard che è tuttora usata, sebbene in formulazioni modificate. Negli anni ′70 i matematici cominciarono a porre particolare attenzione alle equazioni che regolano i semiconduttori; nei primi tempi l'enfasi era sul fornire risultati di esistenza, unicità e regolarità delle soluzioni utilizzando i metodi astratti dalla teoria delle equazioni differenziali alle derivate parziali e sulla analisi classica della convergenza dei metodi di discretizzazione. In seguito l'interazione tra matematici e fisici ha permesso lo sviluppo di tecniche numeriche avanzate che hanno reso possibile la simulazione di complicati dispositivi multi-dimensionali, e nello stesso tempo ha permesso una comprensione matematica più rigorosa di modelli più realistici e complessi. In seguito ai risultati raggiunti nella simulazione numerica uno sviluppo importante è avvenuto negli ultimi anni, lo studio delle equazioni del modello per mezzo della teoria delle perturbazioni singolari. Il concetto matematico delle perturbazioni singolari abbinato all'espansione asintotica, originariamente sviluppati per lo studio dei fenomeni dello strato limite in fluidodinamica, viene utilizzato per determinare analiticamente la struttura delle soluzioni del problema, per mezzo della descrizione della variazione locale delle soluzioni in termini di parametri fisici. L'analisi della perturbazionane singolare per i dispositivi a semiconduttore ha permesso di comprendere meglio il comportamento degli schemi di discretizzazione e di sviluppare inoltre nuovi metodi di raffinamento adattativo. Questo ha reso possibile la creazione di nuovi efficienti programmi di simulazione per dispositivi multistrato altamente miniaturizzati. Grazie a tali studi al giorno d'oggi ogni compagnia che produce dispositivi a semiconduttore utilizza un approccio di tipo misto simulazione-prototipo per lo sviluppo e l'analisi dei dispositivi.

2. – Problemi di frontiera libera e disequazioni quasi-variazionali.

In questo lavoro si presenta lo studio matematico e numerico di problemi di frontiera libera che insorgono nella teoria dei semiconduttori. Con il termine *problemi di frontiera libera* si vogliono indicare quei problemi differenziali alle derivate parziali su domini che hanno incognite alcune parti della frontiera. Sono cioè dei problemi differenziali dove è incognita non solo la soluzione di una opportuna equazione differenziale, ma anche il dominio stesso in cui deve essere soddisfatta: di tale dominio è conosciuta una parte della frontiera, sulla quale si può imporre una condizione ai limiti, e rimane incognita la parte restante, la *frontiera libera*.

Negli ultimi anni sono stati realizzati notevoli sviluppi nello studio di questi problemi con l'introduzione di un'approccio variazionale che permette di studiare l'esistenza e la regolarità delle soluzioni. I problemi classici da cui sono partiti gli studi sono problemi con ostacolo, problemi di Stefan, in seguito si sono trattati problemi di filtrazione nei mezzi porosi, problema della fusione controllata del plasma in un campo magnetico, problemi di turbolenza nei fluidi viscosi, problemi di solidificazione nella crescita di cristalli. In particolare si prende in considerazione un problema di frontiera libera nella teoria dei semiconduttori: la determinazione della zona di svuotamento per il caso stazionario di un diodo a giunzione $p-n$; infatti applicando una tensione esterna al dispositivo si viene a definire una zona, detta di carica spaziale, la cui ampiezza dipende dal verso di polarizzazione; il contorno che delimita tale zona costituisce la frontiera libera. I legami tra disequazioni variazionali e problemi di frontiera libera sono stati messi in luce da Lewy e Stampacchia [1]; la maggior parte dei problemi di frontiera libera viene risolto per mezzo di una riformulazione del problema in forma variazionale. Tuttavia molti problemi di frontiera libera non possono essere tradotti direttamente in termini di disequazioni variazionali; in particolare per un problema di frontiera libera nello studio dei moti di filtrazione dei fluidi attraverso materiali porosi, è stato dimostrato da Baiocchi [3] che la trattazione variazionale è possibile pur di effettuare un opportuno cambiamento di funzione incognita; tale artificio si è rivelato utile in molti altri problemi di frontiera libera. In questo lavoro si studia il problema del diodo a giunzione e per mezzo di alcune osservazioni di carattere fisico e con l'introduzione dei livelli quasi Fermi viene proposta una trasformazione del problema in modo da ottenere una formulazione quasi-variazionale come problema di doppio ostacolo.

Si giunge a risolvere un problema del tipo:

$$(1) \qquad \begin{cases} \text{Trovare } u \in K(u) \text{ tale che} \\ a(u, \varphi - u) \geqslant (\zeta, \varphi - u), \qquad \forall \varphi \in K(u) \\ \text{con } \zeta \in L^{\infty}(D) \end{cases}$$

la quale non è una disequazione variazionale, lo è solo quando

$$\forall u \in U, \qquad K(u) = K$$

con K convesso chiuso non vuoto. Tale entità prende il nome di *disequazione quasi-variazionale* in accordo con Bensoussan-Goursat-Lions [2]. I problemi con disequazioni quasi-variazionali sono in genere risolvibili riportando il problema ad una famiglia di disequazioni variazionali dipendenti da un parametro reale, anzichè del parametro funzionale delle disequazioni quasi-variazionali. Si utilizzano tecniche risolutive per l'approssimazione agli elementi finiti del problema con doppio ostacolo (variabili di Slotboom, tecniche di scalatura, BCG con schema EBE, SOR con proiezione).

In seguito a tale approccio si è potuto affrontare in dettaglio lo studio dell'errore per un sistema di disequazioni quasi-variazionali, e si fornisce una stima per l'errore in L^{∞} per l'approssimazione agli elementi finiti [4].

A motivo di confronto con il metodo presentato e le classiche tecniche di calcolo abitualmente utilizzate, si affronta lo studio dell'approssimazione numerica del classico modello drift-diffusion. Tale modello è un sistema di tre equazioni differenziali non lineari accoppiate nelle tre variabili costituite dal potenziale elettrostatico e le concentrazioni di carica.

Si utilizza lo schema iterativo di Gummel per disaccoppiare le equazioni e linearizzare il sistema, e in seguito si pone particolare attenzione all'approssimazione delle equazioni di trasporto, che sono equazioni di convezione-diffusione, nel particolare contesto dei dispositivi a semiconduttori; la presenza di forti variazioni del termine convettivo all'interno di piccole regioni del dominio dà luogo a strati limite interni per la concentrazione e questo rende il problema diffusivo-convettivo a *convezione dominante*. Come è noto la soluzione numerica di tali equazioni presenta notevoli oscillazioni e instabilità utilizzando tecniche standard di discretizzazione, vengono quindi presentate strategie alternative che permettano di abbattere le oscillazioni, con particolare attenzione al classico metodo Scharfetter-Gummel.

Come conclusione i risultati numerici mostrano che il modello modificato mediante disequazioni quasi-variazionali produce risultati fisici attendibili, inoltre i valori numerici della ampiezza della zona di svuotamento mostrano coerenza con i risultati ottenuti con il modello drift-diffusion. Quindi il metodo proposto fornisce una valida alternativa al modello drift diffusion e non presenta problemi di instabilità delle soluzioni, inoltre il metodo con disequazioni quasi-variazionali può essere esteso a geometrie tridimensionali senza particolari limitazioni, che invece complicano il modello drift-diffusion.

BIBLIOGRAFIA

[1] C. Baiocchi,, *Su un problema di frontiera libera connesso a questioni di idraulica*, Annali Mat. Pura e appl., **92** (1972), 107-127.

[2] A. Bensoussan, Goursat M., J.L. Lions, *Controle impulsionnel et inequations quasi-variationnelles stationnaires*, C.R. Acad. SC. Paris, **276** (1973), 1279-1284.

[3] H. Lewy, G. Stampacchia, *On the regularity of the solution of a variational inequality*, Comm. Pure Appl. Math., **22** (1969), 153-188.

[4] M. Morandi Cecchi, M.R. Russo, *The Error Analysis in a Free Boundary Problem in Semiconductors*, Proceedings of the Fifth World Congress on Computational Mechanics (WCCM V), Vienna, Editors: Mang, H.A.; Rammerstorfer, F.G.; Eberhardsteiner, J., Publisher: Vienna University of Technology, Austria.

Dipartimento di Matematica Pura ed Applicata, Università degli Studi di Padova
e-mail: mrrusso@math.unipd.it
Dottorato in Matematica Computazionale (sede amministrativa: Padova) - Ciclo XII
Direttore di ricerca: Prof. M. Morandi Cecchi, Università di Padova.