

## SOLUCIÓN POR ELEMENTOS FINITOS DE LA ECUACIÓN DEL GRADIENTE DE DENSIDAD

JORGE MAURICIO RUIZ V. (\*)  
IGNACIO MANTILLA P. (\*\*)  
HERNÁN ESTRADA B. (\*\*\*)

---

RESUMEN. Se presenta una discretización por elementos finitos de la ecuación del gradiente de la densidad, previa sustitución exponencial de variables. Con base en el teorema de punto fijo de Schauder se obtiene la existencia de la solución débil. Finalmente la efectividad del esquema numérico propuesto se comprueba con la simulación del condensador MOS en régimen inverso.

PALABRAS CLAVES. Ecuación del gradiente de la densidad, Teorema de punto fijo de Schauder, simulación del condensador MOS en régimen inverso.

2000 MATHEMATICS SUBJECT CLASSIFICATION: 65H99 , 65Z05

ABSTRACT. A finite element discretization for the density gradient equation, previous exponential transformation of variables, is presented. Existence result of the weak solution is obtained by employing Schauder's fixed point theorem. To test the proposed numerical scheme a MOS capacitor in inverse regime is simulated.

KEY WORDS AND PHRASES. Density gradient equation, Schauder's fixed point theorem, MOS capacitor in inverse regime simulation.

---

(\*) Jorge Mauricio Ruiz V., Departamento de Matemáticas, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá. E-mail: jmruizv@unal.edu.co

(\*\*) Ignacio Mantilla P., Departamento de Matemáticas, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá. E-mail: imantillap@unal.edu.co

(\*\*\*) Hernán Estrada B., Departamento de Matemáticas, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá. E-mail: hestrada@unal.edu.co .

## 1. INTRODUCCIÓN

El modelo de arrastre y difusión (DD) ha sido durante los últimos 50 años la herramienta matemática por excelencia usada en el análisis, simulación y diseño de dispositivos semiconductores [9], [10]. Sin embargo, debido a la gran carrera de la miniaturización, el modelo DD se ha quedado corto en reproducir efectos cuánticos tales como el tunelamiento cuántico y el confinamiento cuántico propios de estas escalas. Para superar este inconveniente M. G. Ancona [4] y G. J. Iafrate [5] proponen el modelo del gradiente de la densidad, también conocido como modelo cuántico de arrastre y difusión (QDD), aprovechando que éste es una regularización dispersiva del modelo clásico de arrastre y difusión (DD), que incorpora efectos cuánticos de una manera general y compacta. Por esta razón este modelo es el indicado para reemplazar el modelo clásico DD.

Al considerar por completo las propiedades cuánticas de los electrones, aparecen altas densidades, tales como fuertes capas de inversión y acumulación, complicando el análisis matemático y haciendo imposible la obtención analítica de relaciones entre las cantidades físicas en cuestión. Es así como el tratamiento numérico de dichos modelos se ha convertido en la única alternativa para la obtención de resultados realmente confiables. Sin embargo desde el punto de vista del análisis numérico la tarea tampoco es trivial, pues el modelo QDD, como veremos en la sección 2, involucra un problema no lineal perturbado singularmente. La consecuencia es que los errores de consistencia en diferencias finitas y de aproximación en elementos finitos aumentan sobre mallas estándar a medida que el parámetro de perturbación tiende a cero.

Con el fin de evitar estos problemas, en [2] se propone un esquema no lineal de diferencias finitas. Sin embargo, este esquema tiene la desventaja de no poder considerar condiciones de Dirichlet homogéneas en la frontera, sino sólo aproximaciones del cero. Observándose que la solución numérica es altamente sensible para diferentes aproximaciones del cero, es necesario recurrir a refinamientos de la malla en cercanías de la frontera en cuestión y de este modo aumenta el costo computacional del cálculo [14], [17]. En otra línea de investigación se opta primero por linealizar el problema empleando un método de Newton amortiguado y luego el problema es discretizado por medio de elementos finitos lineales a trozos. El parámetro de amortiguamiento del método de Newton se selecciona de tal manera que se satisfaga un principio del máximo para poder garantizar la positividad de la solución del sistema de ecuaciones lineales provenientes de la discretización [13].

En este trabajo proponemos un nuevo esquema numérico no lineal basado en una transformación exponencial de variables y elementos finitos, el cual conduce directamente a una solución positiva en contraste con [13]. Además los sistemas no lineales de ecuaciones obtenidos aquí son mucho más simples que los deducidos en [3], [12] y [13]. Las dos grandes ventajas de nuestra discretización son:

su eficiencia para reproducir las capas límites con pocos puntos en la malla, así como su estabilidad con respecto a diferentes aproximaciones de la condición de Dirichlet homogénea de frontera.

En la sección 2 se presenta una deducción del modelo QDD. Resultados de existencia de la solución débil de la ecuación de la densidad del gradiente se ilustran en la sección 3. En la sección 4 se describe el esquema de elementos finitos propuesto. Finalmente en 5 se presentan resultados numéricos para un diodo MOS (metal-oxide-semiconductor).

## 2. DEL MODELO DD AL MODELO QDD

Las ecuaciones del modelo cuántico de arrastre y difusión (QDD) pueden deducirse directamente del modelo DD, de la siguiente manera: el modelo (DD) no estacionario unidimensional en  $\Omega := [0, 1]$  escalado está descrito por el siguiente sistema de ecuaciones diferenciales parciales

$$(2.1) \quad -\lambda^2 \partial_{xx} V = p - n + C_{dop}$$

$$(2.2) \quad \partial_t n = \partial_x J_n$$

$$(2.3) \quad \partial_t p = -\partial_x J_p$$

donde  $n = n(x, t) \geq 0$  es la densidad de electrones,  $p = p(x, t) \geq 0$  es la densidad de huecos,  $J_n$ ,  $J_p$  son las densidades de corriente de electrones y huecos respectivamente dadas por

$$(2.4) \quad J_n = \mu_n (\partial_x n - n \partial_x V_n)$$

$$(2.5) \quad J_p = -\mu_p (\partial_x p - p \partial_x V_p),$$

$V = V(x)$  es el potencial electrostático y  $V_n$  y  $V_p$  denotan los correspondientes “potenciales de arrastre” de electrones y huecos. Los parámetros físicos escalados son la longitud de Deybe  $\lambda$ , las movilidades de electrones  $\mu_n$  y huecos  $\mu_p$ . El perfil de dopaje  $C_{dop} = C_{dop}(x)$  representa una distribución fija de cargas en el material semiconductor.

Mientras que en el modelo clásico (DD) los potenciales de arrastre  $V_n$  y  $V_p$  son iguales al potencial electrostático  $V$  es decir  $V_n = V_p = V$ , el modelo cuántico (QDD) debe incluir el “potencial cuántico” llamado potencial de Bohm [4], el cual se le adiciona a los potenciales de arrastre, obteniendo así :

$$(2.6) \quad V_n := V + \varepsilon^2 \frac{\partial_{xx} \sqrt{n}}{\sqrt{n}}, \quad V_p := V + \xi \varepsilon^2 \frac{\partial_{xx} \sqrt{p}}{\sqrt{p}}$$

donde  $\varepsilon$  es la constante de Planck escalada y  $\xi$  la razón entre la masa efectiva de electrones y huecos. Las densidades de corrientes de electrones y huecos se determinan por las densidades de carga, los niveles cuánticos de cuasi-Fermi  $F(x)$ ,  $G(x)$  y las movilidades, esto es

$$(2.7) \quad J_n = \mu_n n \partial_x F, \quad J_p = -\mu_p p \partial_x G.$$

Sustituyendo las ecuaciones (2.6) y (2.7) en las ecuaciones (2.4) y (2.5) del modelo (DD) tenemos que

$$(2.8) \quad n\mu_n \partial_x F = \mu_n \left( \partial_x n - n \partial_x V - n \varepsilon^2 \partial_x \left( \frac{\partial_{xx} \sqrt{n}}{\sqrt{n}} \right) \right)$$

y

$$(2.9) \quad -p\mu_p \partial_x G = -\mu_p \left( \partial_x p - p \partial_x V + p \xi \varepsilon^2 \partial_x \left( \frac{\partial_{xx} \sqrt{p}}{\sqrt{p}} \right) \right).$$

Después de dividir ambos lados de las ecuaciones (2.8) y (2.9) por  $n\mu_n$  y  $-p\mu_p$  respectivamente obtenemos

$$(2.10) \quad \partial_x F = \frac{\partial_x n}{n} - \partial_x V - \varepsilon^2 \partial_x \left( \frac{\partial_{xx} \sqrt{n}}{\sqrt{n}} \right),$$

$$(2.11) \quad \partial_x G = \frac{\partial_x p}{p} - \partial_x V + \xi \varepsilon^2 \partial_x \left( \frac{\partial_{xx} \sqrt{p}}{\sqrt{p}} \right).$$

Teniendo en cuenta que

$$\partial_x(\log n) = \frac{\partial_x n}{n} \quad \partial_x(\log p) = \frac{\partial_x p}{p}$$

e integrando con respecto a  $x$ , obtenemos el modelo de corrección cuántica (QDD), apartir de la ecuación (2.1) como sigue:

$$(2.12) \quad \begin{aligned} -\lambda^2 \partial_{xx} V &= p - n + C_{dop} \\ -\varepsilon^2 \frac{\partial_{xx} \sqrt{n}}{\sqrt{n}} + \log n - V &= F \end{aligned}$$

$$(2.13) \quad -\xi \varepsilon^2 \frac{\partial_{xx} \sqrt{p}}{\sqrt{p}} + \log p + V = -G$$

y sustituyendo (2.7) en (2.2) y (2.3) se obtiene:

$$(2.14) \quad \partial_t n = \partial_x(\mu_n n \partial_x F)$$

$$(2.15) \quad \partial_t p = -\partial_x(\mu_p p \partial_x G)$$

Así tenemos un sistema de cinco ecuaciones diferenciales de segundo orden con variables  $V, n, p, F, G$ .

Para garantizar que el sistema de ecuaciones (2.1), (2.12) - (2.15) corresponda a un problema bien planteado, consideramos las siguientes condiciones de Dirichlet que modelan los contactos resistivos del dispositivo

$$(2.16) \quad n = n_D, \quad p = p_D, \quad V = V_D + V_{ext} \quad \text{en } \partial\Omega,$$

$$(2.17) \quad F = F_{eq} + V_{ext}, \quad G = G_{eq} + V_{ext} \quad \text{en } \partial\Omega$$

donde  $V_{ext}$  denota el voltaje aplicado al dispositivo y  $F_{eq}, G_{eq}$  son los valores de equilibrio de los niveles cuánticos de cuasi-Fermi [4].

Consideremos además que la densidad de electrones y huecos en el instante  $t = 0$  es

$$n(\cdot, 0) = n_I(\cdot) \quad \text{y} \quad p(\cdot, 0) = p_I(\cdot) \quad \text{en } \Omega$$

respectivamente.

El modelo QDD incorpora, a diferencia del modelo clásico de arrastre y difusión (DD) las ecuaciones adicionales (2.12) y (2.13), las cuales contienen el término de corrección cuántica. Dichas ecuaciones reciben el nombre de la ecuación del gradiente de la densidad para electrones y huecos respectivamente.

Desde el punto de vista numérico, las ecuaciones (2.1), (2.14) y (2.15) del modelo QDD pueden resolverse por métodos comunes. Sin embargo las ecuaciones del gradiente de la densidad (2.12) y (2.13) traen consigo nuevos retos numéricos por su carácter no lineal y por ser problemas singularmente perturbados, toda vez que en general las constantes escaladas son muy pequeñas. En efecto  $\varepsilon^2, \xi, \lambda^2 = O(10^{-2, \dots, -4})$  dando lugar a capas límites o internas [2], las cuales no son fáciles de reproducir por medio de esquemas de discretización estándar.

### 3. ECUACIÓN DEL GRADIENTE DE LA DENSIDAD

Por simplicidad consideraremos el caso unipolar (un solo tipo de portador) de la ecuación del gradiente de densidad (2.12) homogénea:

$$(3.1) \quad -\varepsilon^2 \left( \frac{\partial_{xx} \sqrt{n}}{\sqrt{n}} \right) + \log(n) + V = 0,$$

$$(3.2) \quad n(0) = \alpha \quad n(1) = \beta.$$

sobre un dominio acotado  $\Omega = (0, 1)$  y para un potencial dado  $V \in L^\infty(\Omega)$ .

En [2] y [18] se señala que debido a los efectos cuánticos que ocurren al interior del semiconductor, la densidad de electrones cambia en varios órdenes de magnitud en un intervalo muy pequeño de longitud (capas límites). Con el fin de considerar dicho comportamiento reemplazamos la variable de densidad  $n$  por una variable  $u = \frac{1}{2} \log(n)$ . Esta sustitución nos permite considerar las rápidas variaciones de la densidad  $n$ , además de garantizar la positividad de la solución numérica de manera directa sin necesidad de recurrir a técnicas de amortiguamiento del método de Newton para aseguren el principio del máximo como las descritas en [13].

Después de multiplicar por  $\sqrt{n}$  la ecuación (3.1) y de emplear la transformación exponencial  $n = e^{2u}$  obtenemos el problema en términos de la nueva variables  $u$ :

$$(3.3) \quad -\varepsilon^2 \partial_{xx} e^u + e^u (2u + V) = 0,$$

$$(3.4) \quad u(0) = \frac{1}{2} \log(\alpha) \quad u(1) = \frac{1}{2} \log(\beta).$$

Es precisamente esta ecuación la que estamos interesados en resolver por medio del método de elementos finitos. Para ello multiplicamos (3.3) por cualquier función  $\phi \in H_0^1(\Omega)$  e integramos por partes, obteniendo la correspondiente formulación débil:

Encuentre  $u \in u_D + H_0^1(\Omega)$  tal que

$$(3.5) \quad \varepsilon^2 \int_{\Omega} e^u \partial_x u \partial_x \phi \, dx + \int_{\Omega} (2u + V)e^u \phi \, dx = 0, \quad \forall \phi \in H_0^1(\Omega),$$

donde  $u_D$  es una extensión de las condiciones de frontera en  $H^1(\Omega)$ .

Puesto que la formulación de la ecuación del gradiente de la densidad en términos de la variable logarítmica  $u$  es novedosa, es de gran interés preguntarse acerca de la existencia de su solución débil. Para este fin necesitamos la siguiente proposición.

**Proposición 3.1.** Sean  $V(x) \in H^1(\Omega)$  y  $\bar{V}, \underline{V} \in \mathbb{R}$  constantes tal que

$$\underline{V} \leq V \leq \bar{V} \quad \text{para todo } x \in \Omega.$$

Sea  $w \in H_0^1(\Omega)$  fijo. Entonces la siguiente “modificación lineal” del problema (3.5) :

$$(3.6) \quad \varepsilon^2 \int_{\Omega} e^w \partial_x u \partial_x \phi \, dx + \int_{\Omega} (2u + V)e^w \phi \, dx = 0, \quad \forall \phi \in H_0^1(\Omega),$$

tiene una única solución  $u \in H_0^1(\Omega)$ . Además  $u$  es acotada inferior y superiormente, es decir

$$\underline{u} \leq u \leq \bar{u} \quad \text{para todo } x \in \Omega$$

con  $\underline{u} = -\bar{V}/2$  y  $\bar{u} = -\underline{V}/2$ .

*Prueba.* La existencia y unicidad de la solución de (3.6) se garantiza por el teorema de Lax Milgram ([7]).

Ahora probemos que  $\underline{u}$  es una cota inferior de  $u$ . Tomando como función Test  $\phi := (u - \underline{u})^-$  ( parte negativa de  $u - \underline{u}$  ) en la ecuación (3.6) tenemos,

$$(3.7) \quad 0 = \varepsilon^2 \int_{\Omega} e^w \partial_x u \partial_x (u - \underline{u})^- \, dx + \int_{\Omega} (2u + V)e^w (u - \underline{u})^- \, dx,$$

$$(3.8) \quad = \varepsilon^2 \int_{\Omega} e^w (\partial_x (u - \underline{u})^-)^2 \, dx + \int_{\Omega} (2u + V)e^w (u - \underline{u})^- \, dx.$$

La primera integral de (3.8) es positiva, y puesto que  $\underline{u} = -\bar{V}/2$ ,

$$(2u + V)e^w (u - \underline{u})^- \geq (2u + \bar{V})e^w (u - \underline{u})^- \geq 0$$

entonces también la segunda integral es positiva. Por lo tanto (3.8) se satisface sí y sólo sí  $(u - \underline{u})^- = 0$ , lo cual implica  $u \geq \underline{u}$ .

De manera similar se demuestra que  $u \leq \bar{u}$ . En efecto, sea  $\phi := (u - \bar{u})^+$  la función Test. Entonces de la ecuación (3.6) se tiene

$$(3.9) \quad 0 = \varepsilon^2 \int_{\Omega} e^w (\partial_x(u - \bar{u})^+)^2 dx + \int_{\Omega} (2u + V)e^w (u - \bar{u})^+ dx.$$

De nuevo la primera integral es positiva así como la segunda, dado que  $\bar{u} = -\underline{V}/2$ . Entonces (3.9) se cumple siempre y cuando  $(u - \bar{u})^+ = 0$ , por consiguiente se debe tener que  $u \leq \bar{u}$ .  $\square$

**Teorema 3.1.** El problema no lineal (3.3) - (3.4) tiene una solución  $u$  en el espacio  $H_0^1(\Omega)$ .

*Prueba.* Para establecer la existencia de una solución de (3.3) - (3.4), empleamos el teorema de punto fijo de Schauder. Primero, definamos el conjunto cerrado, convexo y acotado

$$\mathcal{N} = \{\phi \in L^2(\Omega) : \underline{u} \leq \phi \leq \bar{u}\},$$

donde las cotas superior e inferior son dadas por  $\bar{u} = -\underline{V}/2$  y  $\underline{u} = -\bar{V}/2$ . Ahora consideremos el operador de punto fijo  $T : \mathcal{N} \rightarrow \mathcal{N}$ , donde  $u = T(w)$  se define como el  $u \in H_0^1(\Omega)$  tal que

$$(3.10) \quad \varepsilon^2 \int_{\Omega} e^w \partial_x u \partial_x \phi dx + \int_{\Omega} (2u + V)e^w \phi(x) dx = 0,$$

para todo  $\phi \in H_0^1(\Omega)$ . Entonces, por la proposición 3.1 existe una única solución de (3.10) y  $u = T(w)$  también estará en  $\mathcal{N}$ . Del teorema de punto fijo de Schauder el operador  $T$  tendrá un punto fijo en  $\mathcal{N}$ , siempre que podamos mostrar que  $T$  es un operador compacto. Para ello, tomemos  $\phi = u$  en (3.10) entonces

$$(3.11) \quad \varepsilon^2 \int_{\Omega} e^w (\partial_x u)^2 dx + 2 \int_{\Omega} e^w u^2 dx = - \int_{\Omega} e^w V u,$$

lo que implica

$$(3.12) \quad \varepsilon^2 e^{\underline{u}} \|\partial_x u\|_{L^2(\Omega)}^2 + 2e^{\underline{u}} \|u\|_{L^2(\Omega)}^2 \leq e^{\bar{u}} \|V\|_{L^2(\Omega)} \|u\|_{L^2(\Omega)}.$$

Luego claramente

$$(3.13) \quad \varepsilon^2 e^{\underline{u}} (\|\partial_x u\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|u\|_{L^2(\Omega)}^2) \leq e^{\bar{u}} \|V\|_{L^2(\Omega)} (\|\partial_x u\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|u\|_{L^2(\Omega)}^2)^{1/2}$$

$$(3.14) \quad \|u\|_{H_0^1(\Omega)} \leq \frac{e^{\bar{u}-\underline{u}}}{\varepsilon^2} \|V\|_{L^2(\Omega)}$$

o también

$$\|T(w)\|_{H_0^1(\Omega)} = \|u\|_{H_0^1(\Omega)} \leq K, \quad \forall w \in \mathcal{N}.$$

donde  $K := \frac{e^{\bar{u}-\underline{u}}}{\varepsilon^2} \|V\|_{L^2(\Omega)}$ . Por lo cual,  $T(\mathcal{N})$  es un conjunto acotado en  $H_0^1(\Omega)$ .

Usando la compacidad de la inmersión de  $H_0^1(\Omega)$  en  $L^2(\Omega)$  se concluye que  $T(\mathcal{N})$  es un conjunto compacto en  $L^2(\Omega)$ , esto significa que el operador  $T$  es un operador compacto. Aplicando el teorema de Schauder, el operador  $T$  tiene un punto fijo en  $\mathcal{N}$ . Por consiguiente existe una solución de (3.3) - (3.4).  $\square$

**Nota 3.1.** De hecho, la solución  $u$  tiene mayor regularidad. De la identidad  $-\varepsilon^2 \partial_{xx} u = \varepsilon^2 (\partial_x u)^2 - 2u - V \in L^1(\Omega)$  se tiene que  $u \in W^{2,1}(\Omega)$ . Ahora bien, el teorema de inmersión de Sobolev [1] implica que  $\partial_x u \in L^4(\Omega)$  y por ende tenemos  $u \in H^2(\Omega)$ .

Ahora que la pregunta sobre la solubilidad de (3.5) esta resuelta, concentremos nuestra atención en su solución numérica.

#### 4. DISCRETIZACIÓN NUMÉRICA

Para calcular una aproximación numérica de la solución del problema (3.5), consideremos una partición  $\{0 = x_0 < x_1 < \dots < x_N = 1\}$  del intervalo  $[0, 1]$  y denotemos por

$$h_i := x_i - x_{i-1}, \quad i = 1, \dots, N, \quad \text{y} \quad h := \max_{i=1, \dots, N} h_i.$$

Entonces tenemos:

$$[0, 1] = \bigcup_{i=1}^N I_i \quad \text{donde} \quad I_i = [x_{i-1}, x_i].$$

Sea ahora

$$V_h := \{\phi \in H_0^1(\Omega) : \phi|_{I_i} \in \mathbb{P}_1, \quad i = 1, \dots, N\}$$

el espacio de funciones lineales a trozos sobre  $\Omega$ , el cual es un subespacio de dimensión finita de  $H_0^1(\Omega)$  y es generado por la base  $\{b_1, \dots, b_{N-1}\}$  con

$$b_i(x) = \begin{cases} \frac{x-x_{i-1}}{h_i} & \text{si } x \in I_i, \\ \frac{x_{i+1}-x}{h_{i+1}} & \text{si } x \in I_{i+1}, \\ 0 & \text{en otro caso.} \end{cases}$$

Entonces, el problema discreto es el siguiente: Encuentre  $u_h \in u_D + V_h$  tal que

$$(4.1) \quad \varepsilon^2 \int_{\Omega} e^{u_h} \partial_x u_h \partial_x b_i(x) dx + \int_{\Omega} (2u_h + V) e^{u_h} b_i(x) dx = 0,$$

para  $i = 1, \dots, N - 1$ .

Para resolver este sistema no lineal de ecuaciones es necesario primero evaluar las integrales que aparecen en (4.1). Con este fin, calculamos de manera exacta la primera integral de (4.1) y la segunda integral la aproximamos mediante una regla de cuadratura basada en la interpolación lineal de una de las partes del correspondiente integrando. Lo anterior permite un fácil tratamiento del sistema no lineal discreto de ecuaciones.



Más explícitamente reemplazamos el problema discreto (4.1) por: Encuentre  $u_h \in u_D + V_h$  tal que

$$(4.2) \quad \varepsilon^2 \int_{\Omega} e^{u_h} \partial_x u_h \partial_x b_i(x) dx + \int_{\Omega} (2u_h + V)^I e^{u_h} b_i(x) dx = 0,$$

para  $i = 1, \dots, N-1$ , donde  $(\cdot)^I$  denota el interpolador lineal sobre la malla.

Después de evaluar cada una de las integrales de (4.2) obtenemos el siguiente sistema no lineal de ecuaciones

$$(4.3) \quad -\varepsilon^2 \frac{1}{h_i} e^{u_{i-1}} + \varepsilon^2 \left( \frac{1}{h_i} + \frac{1}{h_{i+1}} \right) e^{u_i} - \varepsilon^2 \frac{1}{h_{i+1}} e^{u_{i+1}} + \frac{1}{6} h_i e^{u_{i-1}} (2u_{i-1} + V_{i-1}) \\ + \frac{1}{3} (h_i + h_{i+1}) e^{u_i} (2u_i + V_i) + \frac{1}{6} h_{i+1} e^{u_{i+1}} (2u_{i+1} + V_{i+1}) = 0,$$

para  $i = 1, \dots, N-1$ .

Para resolver este problema usamos el método de Newton

$$u^{[k+1]} = u^{[k]} + \omega^{[k]}$$

donde  $\omega^{[k]}$  es la solución del sistema lineal

$$J^{[k]} \omega^{[k]} = -F(u^{[k]}).$$

con  $F(u) : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^N$  dada por (4.3), y  $J^{[k]} := F'(u^{[k]})$  es la matriz Jacobiana cuyas componentes son

$$J_{ij} = \begin{cases} -\frac{\varepsilon^2}{h_i} e^{u_{i-1}} + \frac{1}{6} h_i e^{u_{i-1}} (2u_{i-1} + V_{i-1} + 2) & \text{si } j = i-1 \\ \varepsilon^2 \left( \frac{1}{h_i} + \frac{1}{h_{i+1}} \right) e^{u_i} + \frac{1}{3} (h_i + h_{i-1}) e^{u_i} (2u_i + V_i + 2) & \text{si } j = i \\ -\frac{\varepsilon^2}{h_{i+1}} e^{u_{i+1}} + \frac{1}{6} h_{i+1} e^{u_{i+1}} (2u_{i+1} + V_{i+1} + 2) & \text{si } j = i+1 \\ 0 & \text{en otro caso.} \end{cases}$$

**Nota 4.1.** Reescribiendo la ecuación (4.3) en términos de la variable  $s_i = e^{u_i}$  obtenemos

$$(4.4) \quad -\varepsilon^2 \frac{s_i}{h_i} + \varepsilon^2 \left( \frac{1}{h_i} + \frac{1}{h_{i+1}} \right) s_i - \varepsilon^2 \frac{s_i}{h_{i+1}} + \frac{1}{6} h_i s_{i-1} (2 \log(s_{i-1}) + V_{i-1}) \\ + \frac{1}{3} (h_i + h_{i+1}) s_i (2 \log(s_i) + V_i) + \frac{1}{6} h_{i+1} s_{i+1} (2 \log(s_{i+1}) + V_{i+1}) = 0.$$

Si sumamos los términos de orden cero en (4.4) y linealizamos la ecuación resultante se obtiene la misma discretización presentada en [13]. Por otra parte (4.4) se asemeja al esquema conservativo lineal propuesto en [3]. La diferencia radica en el tratamiento del segundo término. Mientras en el esquema conservativo lineal se emplea el teorema del valor medio y la regla de trapecio para

aproximar esta integral. Aquí realizamos la integración exacta del producto de dos funciones lineales.

## 5. RESULTADOS NUMÉRICOS

Con el fin de observar el comportamiento del esquema de discretización propuesto, estudiamos el condensador MOS (metal-oxide-semiconductor) el cual es base del que presumiblemente es el más importante componente semiconductor, el transistor MOSFET (metal-oxide-semiconductor field-effect transistor). Este consiste de un pieza de material semiconductor uniformemente dopada, cubierta por una capa delgada de un material aislante en la cual reposa un contacto metálico llamado compuerta [16].

En particular, estudiamos el comportamiento de la densidad de electrones en la región del semiconductor del dispositivo en el régimen de inversión. Es decir, el voltaje aplicado es lo suficientemente alto de tal manera que las cargas negativas emergen en la interface óxido semiconductor debido a la minoría de portadores, formándose así una capa de inversión [16]. Tal fenómeno es descrito por el siguiente problema de valor en la frontera para la densidad de electrones  $n(x)$

$$(5.1) \quad -\varepsilon^2 \left( \frac{\partial_{xx} \sqrt{n}}{\sqrt{n}} \right) + \log(n) + V = 0, \quad x \in (0, 1)$$

$$(5.2) \quad n(0) = 0, \quad n(1) = 1$$

y la función de potencial  $V$  es dada por

$$V(x) = x(\alpha x - \beta)e^{-\delta x};$$

donde  $\alpha = -47,57$ ,  $\beta = 5,42$  y  $\delta = 19,45$ . La forma explícita de  $V(x)$  fue obtenida por medio de un ajuste exponencial de los datos calculados previamente del problema acoplado completo.

Nótese que el esquema de discretización presentado aquí no puede satisfacer la condición de frontera en  $x = 0$  debido a su carácter exponencial. Por tal motivo, debemos tomar un valor muy pequeño cercano a cero como valor en la frontera  $n(0)$ . Con el fin de efectuar las simulaciones numéricas consideramos varios valores de  $n(0)$  y usamos mallas equidistantes de diversos tamaños.

En la figura 5.1 (izquierda) se presenta la solución obtenida por el esquema propuesto, con sólo 50 puntos en la malla, apreciándose claramente que el método numérico reproduce muy bien la capa límite. Además es de notar que a pesar de considerar diferentes aproximaciones de  $n(0) = 0$ , el método es estable con respecto a dicha condición de frontera, lo cual no ocurre con el esquema no lineal de diferencias finitas presentado en [3], como se reporta en [14] y [17].

La figura 5.1 (derecha) muestra el comportamiento del error de aproximación de la densidad de electrones  $n$ , a medida que la malla es refinada en las normas

FIGURA 5.1. Densidad de electrones,  $N = 50$  nodos (izquierda).  
 Error de aproximación (derecha) para valores en la frontera en  $x = 0$   
 $n(0) = 10^{-4}, 10^{-6}, 10^{-8}, 10^{-10}$ .

$L^2(\Omega)$  y  $H^1(\Omega)$ . La comparación se hizo con respecto a la solución obtenida para una malla muy fina ( $h = 1/4500$ ) que representa la solución exacta.

Nótese que se obtienen órdenes de convergencia casi óptimos  $O(h)$  en la norma  $H^1(\Omega)$  y  $O(h^2)$  en la norma  $L^2(\Omega)$ . Este comportamiento de convergencia también se aprecia claramente en las tablas 5.1 y 5.2.

$h$	$\ \hat{u} - u_h\ _{L^2}$	Orden	$\ \hat{u} - u_h\ _{H^1}$	Orden
$\frac{1}{50}$	0.0010845470	—	0.6392448044	—
$\frac{1}{100}$	0.0002487601	1.84	0.3158475476	1.07
$\frac{1}{375}$	0.0000163752	2.44	0.0831007615	1.05
$\frac{1}{900}$	0.0000027241	1.93	0.0345308541	1.01
$\frac{1}{1500}$	0.0000009064	1.77	0.0207185331	1.18
$\frac{1}{2250}$	0.0000003313	1.91	0.0138233519	1.30

CUADRO 5.1. Error de aproximación y orden de convergencia cuando  $n(0) = 10^{-4}$

h	$\ \hat{u} - u_h\ _{L_2}$	Orden	$\ \hat{u} - u_h\ _{H^1}$	Orden
$\frac{1}{50}$	0.0012426902	—	0.6467117403	—
$\frac{1}{100}$	0.0002857969	1.83	0.3203316651	1.06
$\frac{1}{375}$	0.0000186164	2.45	0.0844773947	1.05
$\frac{1}{900}$	0.0000030672	1.93	0.0351199101	1.01
$\frac{1}{1500}$	0.0000010170	1.77	0.0210742222	1.18
$\frac{1}{2250}$	0.0000003803	1.88	0.0140612797	1.30

CUADRO 5.2. Error de aproximación y orden de convergencia cuando  $n(0) = 10^{-8}$

### BIBLIOGRAFÍA

- [1] R. A. Adams, *Sobolev Spaces*, 1st ed., Academic Press, New York, 1975.
- [2] M. Ancona, *Equations of state for silicon inversion layers*, IEEE Trans. Elect. Devices, 47 (2000), pp. 1449-1456.
- [3] M. Ancona, *Finite-difference schemes for the density-gradient equations*, J. Comp. Elect., 1 (2002), pp. 435-443.
- [4] M. Ancona and H. Tiersten, *Macroscopic physics of the silicon inversion layer*, Phys. Rev., 35 (1987), pp. 7959-7965.
- [5] M. G. Ancona and G. J. Iafrate, *Quantum correction of the equation of state of an electron gas in a semiconductor*, Phys. Rev. B, 39 (1989), pp. 9536-9540.
- [6] B.A. Biegel, *Simulation of Ultra-Small Electronic Devices: The Classical-Quantum Transition Region*, NASA Technical Report 97-028, Oct. (1997).
- [7] P. G. Ciarlet, *The Finite Element Method for Elliptic Problems*, 1st ed., North-Holland, Amsterdam, (1978).
- [8] D. Gilbarg and N. S. Trudinger, *Elliptic Partial Differential Equations of Second Order*, 1st ed., Springer-Verlag, Berlin, (1983).
- [9] P. A. Markowich, C. A. Ringhofer, and C. Schmeiser, *Semiconductor Equations*, 1st ed., Springer-Verlag, Wien, (1990).
- [10] M. S. Mock, *Analysis of Mathematical Models of Semiconductor Devices*, Boole Press, Dublin, (1983).
- [11] R. Pinnau, *A review on the quantum drift diffusion model*, Transport Theory Statist. Phys., 31 (2002), pp. 367-395.
- [12] R. Pinnau, *Uniform convergence of the exponentially fitted scheme for the quantum drift-diffusion model*, SIAM J. Numer. Anal. 42, No. 4, 1648-1668 (2004).
- [13] C. Falco, E. Gatti, A.L. Lacaita and R. Sacco *Quantum-corrected drift-diffusion models for transport in semiconductor devices*, J. Comp. Phys., 204 (2), 533-561 (2005).
- [14] J. M Ruiz *Numerical analysis of the transient quantum drift diffusion model for semiconductor Devices*, Tesis de Doctorado, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá (2008)
- [15] J. Stoer and R Bulirsch, *Introduction to numerical analysis*, Springer Verlag, New york (1993)
- [16] S.M Sze, *Physics of semiconductors Devices*, 2nd edition, Willey, New York (1981).
- [17] T. Tang, X. Wang, Y. Li *Discretization Scheme for the Density-Gradient Equation and Effect of Boundary Conditions*, J. Comp. Elect., 1 (2002), pp. 389-393.

- [18] Vasileska D *The Influence of Space-Quantization Effects and Poly-Gate Depletion on the Threshold Voltage, Inversion Layer and Total Gate Capacitances in Scaled Si-MOSFETs*, *Journal of Modeling and Simulation of Microsystems. Vol 1. No 3 (2001) 8*

RECIBIDO: Septiembre de 2008. ACEPTADO PARA PUBLICACIÓN: Diciembre de 2008