

O MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS  
NA SIMULAÇÃO DE UMA JUNÇÃO pn ABRUPTA

*Petronio Pulino*

Orientador:

Prof. Dr. JOSÉ VITÓRIO ZAGO

Dissertação apresentada no Instituto de Matemática, Estatística e Ciência da Computação, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Matemática Aplicada.

Outubro/ 1983

UNICAMP  
BIBLIOTECA CENTRAL

Mas o que foi semeado em  
boa terra é o que ouve e  
compreende a palavra; e dá  
fruto, e um produz cem,  
outro sessenta, e outro trinta.

## ÍNDICE

Agradecimentos

Resumo

Notação

Capítulo I	- Noções do Método de Elementos Finitos .....	1
1.0	Introdução .....	1
1.1	Um Problema Abstrato .....	1
1.2	Aspectos Básicos do Método de Elementos Finitos ....	11
1.3	Aplicação do Método de Rayleigh - Ritz .....	17
1.4	Um Problema Não-Linear .....	22
Capítulo II	- Implementação do Método de Elementos Finitos .	26
Capítulo III	- O Modelo Matemático para Dispositivos Semicondutores .....	43
Capítulo IV	- O Método de Elementos Finitos na Simulação de Dispositivos Semicondutores .....	56
4.0	Introdução .....	56
4.1	As Equações do Método de Galerkin .....	58
4.2	O Método de Newton .....	64
4.3	Uma Base para o Método de Elementos Finitos .....	67

Capítulo V	- Problemas Resolvidos .....	70
5.1	Condições de Equilíbrio numa Junção pn .....	70
5.2	Condições de Desequilíbrio numa Junção pn .....	75
5.3	Conclusões e Sugestões .....	76
Apêndice I	- Implementação Computacional do Método de Ele - mentos Finitos na Simulação de uma Junção pn Abrupta .....	81
Referências	- .....	113

## AGRADECIMENTOS

À Profa. Dra. Maria Cristina Cunha Bezerra que com sua amizade e estímulo contribuiu de forma especial para a conclusão do meu curso de Mestrado e pela orientação inicial do trabalho de tese.

Ao Prof. Dr. José Vitório Zago que, com sua orientação e amizade, possibilitou a realização deste trabalho de tese.

À todas as pessoas que contribuíram, de forma direta ou indireta, para o desenvolvimento deste trabalho.

À FAPESP e ao CNPq pelo apoio financeiro.

Ao Instituto de Matemática, Estatística e Ciência da Computação pelos professores, pessoal administrativo e equipamentos que foram colocados a minha disposição.

O suor fecunda o solo  
e a semente não pergunta  
Brasileiro ou Imigrante  
o importante é o fruto.

À minha mãe Rosa Roncaglia Pulino

## RESUMO

O objetivo desta dissertação é o estudo do comportamento qualitativo das densidades de elétrons e lacunas e do potencial eletrostático em uma junção pn abrupta. O modelo matemático adotado para descrever a condução elétrica nos dispositivos semicondutores, que envolve o fluxo de dois portadores de carga independentes e opostamente carregados, que são os elétrons de condução e as lacunas, consiste em um sistema de equações diferenciais parciais não-lineares, composto por três equações, a saber, a equação de continuidade para elétrons, equação de continuidade para lacunas e a equação de Poisson, que relaciona a carga total com o potencial eletrostático. Estamos tratando o caso de um dispositivo em regime permanente e unidimensional.

Aplicando o método de elementos finitos, onde o espaço de aproximação foi gerado pelas funções de Hermite cúbicas, para encontrar uma solução fraca discreta, para o sistema de equações diferenciais não-lineares, recaímos em um sistema não-linear com  $6N$  equações a  $6N$  incógnitas, onde  $N$  é o número de nós da nossa malha. O sistema não-linear é resolvido pelo método de Newton. Como o sistema possui  $6N$  equações, sua resolução computacional é um tanto inconveniente para valores muito grandes de  $N$ , quando temos o problema de escassez de memória principal. Porém este problema fica resolvido quando utilizamos o método frontal, no qual traba-

lhamos com as submatrizes de rigidez que são definidas em cada elemento finito, e que neste caso são matrizes de dimensão igual a  $12 \times 12$ . Este procedimento torna o processo de resolução computacional mais rápido e utiliza menos memória principal.

A partir desta análise, podemos encaminhar novos trabalhos, com o objetivo de propor um modelo matemático mais eficiente, para simular uma junção pn, ou outros dispositivos semicondutores, tais como, uma célula solar.

## NOTAÇÃO

- $n$  - densidade de elétrons [nº elétrons/  $\text{cm}^3$ ]
- $p$  - densidade de lacunas [nº lacunas/  $\text{cm}^3$ ]
- $n_i$  - densidade de portadores de carga no semicondutor intrínseco [nº portadores/  $\text{cm}^3$ ]
- $N_D$  - densidade de impurezas ionizadas no semicondutor intrínseco
- $\vec{J}_n$  - densidade de corrente para elétrons [ $\text{A}/ \text{cm}^2$ ]
- $\vec{J}_p$  - densidade de corrente para lacunas [ $\text{A}/ \text{cm}^2$ ]
- $R$  - taxa de recombinação de pares elétron-lacuna [nº de portadores/  $\text{sec}$ ]
- $G$  - taxa de geração de pares elétron-lacuna [nº portadores/  $\text{sec}$ ]
- $\mu_n$  - coeficiente de mobilidade para elétrons [ $\text{cm}^2/ \text{V} \cdot \text{sec}$ ]
- $\mu_p$  - coeficiente de mobilidade para lacunas [ $\text{cm}^2/ \text{V} \cdot \text{sec}$ ]
- $D_n$  - coeficiente de difusão para elétrons [ $\text{cm}^2/ \text{sec}$ ]
- $D_p$  - coeficiente de difusão para lacunas [ $\text{cm}^2/ \text{sec}$ ]
- $\epsilon$  - constante dielétrica do semicondutor [ $\text{F}/ \text{cm}$ ]

$q$  - carga do elétron [Coul]

$\psi$  - potencial eletrostático [V]

$\vec{E}$  - campo elétrico [V/ cm]

div - operador divergente

grad - operador gradiente

$L_D$  - comprimento de Debye [cm]

$\tau_n$  - tempo de recombinação dos elétrons [sec]

$\tau_p$  - tempo de recombinação das lacunas [sec]

$N_a$  - densidade de impureza aceitadora ionizada

$N_d$  - densidade de impureza doadora ionizada

$K$  - constante de Boltzmann [Joule/ $^{\circ}$ K]

## CAPÍTULO I

### NOÇÕES DO MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS

#### 1.0 INTRODUÇÃO

O termo elemento finito está associado ao fato de que o espaço de aproximação é constituído de funções "splines" em uma, duas e três dimensões, e através do método de Rayleigh-Ritz, determinamos a solução discreta para a equação em operadores diferenciais. Em casos mais gerais utilizamos o método de Galerkin.

Vamos tratar a formulação do método de Rayleigh-Ritz do ponto de vista do método de quadrados mínimos com respeito à norma energia. Dessa forma se exige que o operador diferencial seja simétrico e definido-positivo em um espaço com produto interno  $V$ , escolhido de modo conveniente.

No método de Galerkin não é necessário que o operador seja simétrico e definido-positivo, pois exige simplesmente que o resíduo da solução discreta seja ortogonal ao espaço de aproximação, isto é, estamos procurando uma solução fraca discreta para a equação em operadores diferenciais.

#### 1.1 UM PROBLEMA ABSTRATO

Muitos problemas de física-matemática e em alguns ramos de

engenharia, são modelados pelo seguinte esquema de minimização: determinar um elemento  $u$  que satisfaça

$$J[u] = \min_{v \in K} \{ J[v] \}, \quad (1)$$

onde  $K$  é um subconjunto de um espaço normado real  $V$ , com norma  $\| \cdot \|_V$ , e o funcional  $J:V \rightarrow \mathbb{R}$  é definido da seguinte forma

$$J[v] = a(v,v) - 2f(v), \quad (2)$$

onde  $a(.,.):V \times V \rightarrow \mathbb{R}$  é uma forma bilinear simétrica e contínua, e  $f:V \rightarrow \mathbb{R}$  é uma forma linear contínua.

TEOREMA 1.1 - Se em adição às suposições acima, assumimos que

- i.  $V$  é um espaço de Banach;
- ii.  $K$  é um subconjunto fechado e convexo de  $V$ ;
- iii. a forma bilinear  $a(.,.)$  é  $V$ -elítica, isto é, existe  $\alpha > 0$  tal que

$$a(v,v) \geq \alpha \|v\|_V^2 \quad (3)$$

para todo  $v \in V$ . Então, o problema (1) possui uma única solução  $u$ , que também é caracterizada pelas seguintes desigualdades:

$$a(u, v-u) \geq f(v-u) \quad (4)$$

para todo  $v \in K$ , isto é, se  $u$  é uma solução do problema (1) então satisfaz a desigualdade (4) e, reciprocamente, se  $u$  satisfaz (4) então é solução do problema (1); ou por

$$a(u, v) \geq f(v) \quad (5)$$

$$a(u, u) = f(u) \quad (6)$$

para todo  $v \in K$ , se  $K$  é um cone convexo e fechado com vértice na origem; ou por

$$a(u, v) = f(v) \quad (7)$$

para todo  $v \in K$ , se  $K$  é um subespaço fechado de  $V$ .

**DEM:** Temos que a forma bilinear  $a(.,.)$

define um produto interno sobre  $V$ , e a norma associada a este produto interno é equivalente à norma  $\| \cdot \|_V$ . Portanto  $V$  é um espaço de Hilbert quando munido da norma definida pelo produto interno. Pelo Teorema de Representação de Riesz, existe um único  $w \in V$  tal que

$$f(v) = a(w, v) ,$$

para todo  $v \in V$ , de modo que, como a forma bilinear  $a(.,.)$  é simétrica, temos

$$\begin{aligned} J[v] &= a(v,v) - 2 a(w,v) \\ &= a(v-w, v-w) - a(w,w) , \end{aligned}$$

portanto resolver o problema (1) é equivalente a minimizar a distância de  $w$  ao subconjunto  $K$ , no sentido da norma  $\| \cdot \|_a = (a(.,.))^{1/2}$ .

Desse modo a solução  $u$  é a projeção de  $w$  sobre o subconjunto  $K$ , com respeito ao produto interno  $a(.,.)$  e, pelo Teorema da Projeção, o elemento  $u \in K$  existe e é único, já que  $K$  é um subconjunto convexo e fechado de  $V$ .

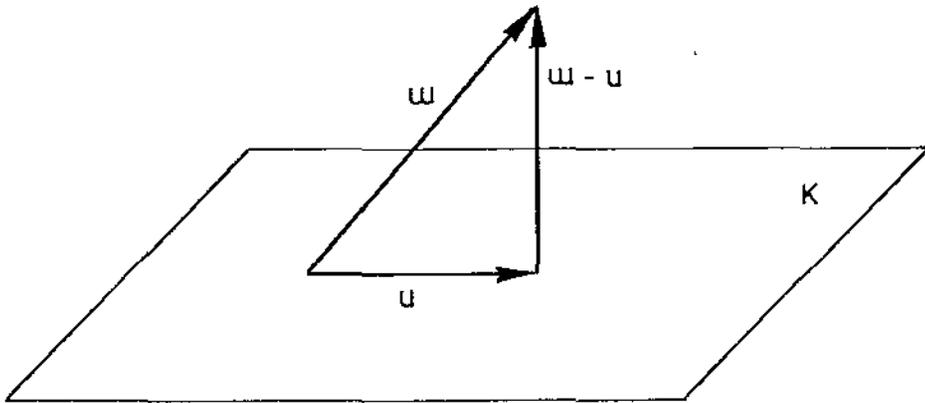


Fig. 1.1

Temos que, a projeção é caracterizada pela seguinte desigualdade

$$a(w-u, v-u) \leq 0 \quad (8)$$

para todo  $v \in K$ , a qual podemos reescrever como

$$f(v-u) = a(w, v-u) \leq a(u, v-u)$$

para todo  $v \in K$ , o que prova a desigualdade (4).

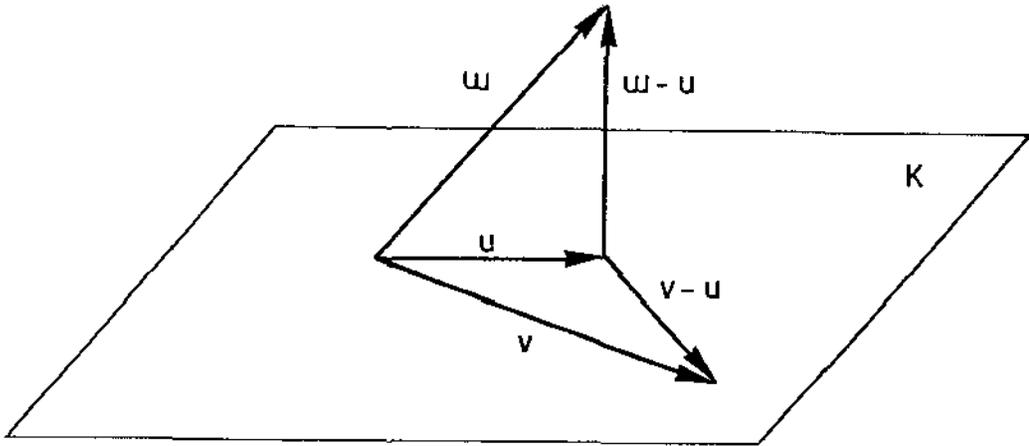


Fig. 1.2

No caso em que  $K$  é um cone com vértice na origem, se  $v \in K$ , então  $(v+u) \in K$ , repassando  $v$  por  $(u+v)$  na desigualdade (4) obtemos

$$f(v) \leq a(u, v) \quad ,$$

para todo  $v \in K$ , o que prova a desigualdade (5).

Para provar a igualdade (6), fazemos  $v=0$  em (4), o que é

possível já que  $0 \in K$ , assim obtemos

$$a(u, u) \leq f(u) \quad (9)$$

e com  $v=u$  em (5), temos

$$a(u, u) \geq f(u) \quad (10)$$

das desigualdades (9) e (10), obtemos

$$f(u) = a(u, u) \quad ,$$

o que prova a igualdade (6). Reciprocamente, obtemos (4) quando subtraímos (6) de (5).

Se  $K$  é um subespaço, reescrevemos a desigualdade (5) com  $v$  e  $-v$ , já que  $-v \in K$ , obtendo

$$a(u, v) \geq f(v) \quad \text{e} \quad a(u, v) \leq f(v) \quad ,$$

portanto

$$a(u, v) = f(v) \quad ,$$

para todo  $v \in K$ , o que prova a igualdade (7). Reciprocamente, (7) implica em (5) e (6).

c.q.d

Dizemos que as caracterizações (4), (5), (6) e (7) são formulações variacionais associadas ao problema de minimização (1). As relações (4) e (5) são também denominadas desigualdades variacionais.

PROBLEMA 1.1 - Mostrar que, se  $u_i$  para  $i = 1, 2$  são soluções do problema (1) correspondentes às formas lineares  $f_i$  para  $i = 1, 2$ , então,

$$\|u_1 - u_2\|_V \leq \frac{1}{\alpha} \|f_1 - f_2\|^* , \quad (11)$$

onde  $\|\cdot\|^*$  denota a norma do espaço dual  $V^*$ .

PROVA: Como  $K$  é um subespaço de  $V$  e,  $u_1, u_2 \in K$ , então  $(u_1 - u_2) \in K$ . Usando o fato que a forma bilinear  $a(\cdot, \cdot)$  é  $V$ -elítica, temos

$$\begin{aligned} \alpha \|u_1 - u_2\|_V^2 &\leq a(u_1 - u_2, u_1 - u_2) \\ &\stackrel{(7)}{=} f(u_1 - u_2) - f_2(u_1 - u_2) \\ &\leq |(f_1 - f_2)(u_1 - u_2)| \\ &\leq \|f_1 - f_2\|^* \|u_1 - u_2\|_V \end{aligned}$$

portanto

$$\|u_1 - u_2\|_V \leq \frac{1}{\alpha} \|f_1 - f_2\|^{*} .$$

c.q.d

Como a solução  $u$  do problema (1) existe, é única (Teorema 1.1) e depende continuamente dos dados iniciais no sentido da desigualdade (11), dizemos que o problema (1) é bem posto.

Obs. 1.1: No Teorema 1.1 não é necessária a hipótese de  $V$  ser um espaço com produto interno, como ficou claro na sua demonstração, desde que a forma bilinear  $a(.,.)$  seja simétrica. Esta hipótese será necessária quando  $a(.,.)$  não for simétrica.

No caso em que a forma bilinear  $a(.,.)$  não é simétrica e  $K=V$ , temos o seguinte teorema:

TEOREMA 1.2: (Lema de Lax-Milgram)

Seja  $V$  um espaço de Hilbert, e  $a(.,.): V \times V \rightarrow \mathbb{R}$  uma forma bilinear contínua e  $V$ -elítica e,  $f: V \rightarrow \mathbb{R}$  uma forma linear contínua.

Então existe um único  $u \in V$  o qual satisfaz

$$a(u, v) = f(v) \tag{12}$$

para todo  $v \in V$ .

DEM: da continuidade de  $a(.,.)$ , segue-se que existe uma constante  $C > 0$  tal que

$$|a(u,v)| \leq C \|u\| \|v\|, \quad (13)$$

para todo  $u, v \in V$ . Portanto para todo  $u \in V$  a forma linear

$$v \in V \longrightarrow a(u,v) \in \mathbb{R}$$

é contínua e, pelo Teorema de Representação de Riesz, existe um único  $w \in V$  tal que

$$a(u,v) = \langle w, v \rangle$$

para todo  $v \in V$ , onde  $\langle , \rangle$  denota o produto interno de  $V$ .

Definimos  $w = G(u)$ , onde  $G$  é uma aplicação linear de  $V$  em  $V$ , de (13) temos que  $\|G\|^* \leq C$ , portanto  $G \in L(V)$ . Para  $G$  ficar bem definido, devemos provar que:

1.  $G$  é biunívoca: Seja  $G(u_0) = 0$ , então  $a(u_0, v) = 0$  para todo  $v \in V$  e, portanto  $a(u_0, u_0) = 0$  donde segue, pela hipótese de  $a(.,.)$  ser  $V$ -elítica, que  $u_0 = 0$ .
2.  $G^{-1}$  é contínua: temos que

$$\begin{aligned} \alpha \|u\|^2 &\leq a(u,u) = \langle G(u), u \rangle \\ &\leq |\langle G(u), u \rangle| \leq \|G(u)\| \|u\| \end{aligned}$$

portanto

$$\|G(u)\| \geq \alpha \|u\|$$

3.  $G(V)$  é um subespaço completo de  $V$ :

Seja  $Y_n = G(x_n) \in G(V)$  uma sequência de Cauchy, por 2. temos que  $\{x_n\}$  é uma sequência de Cauchy, logo

$$Y_n = G(x_n) \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{} G(x) \in G(V)$$

4.  $G(V) = V$  : basta mostrar que dado  $Z \in V$  com  $Z \perp G(V)$  implica  $Z = 0$ . De fato, temos

$$\alpha \|Z\|^2 \leq a(Z,Z) = \langle G(Z), Z \rangle = 0,$$

pois  $Z \perp G(Z)$ , como  $a(\dots)$  é  $V$ -elítica, temos  $Z = 0$ .

c.q.d

## 1.2 ASPECTOS BÁSICOS DO MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS

## O MÉTODO DE GALERKIN

Consideramos o problema linear abstrato: encontrar  $u \in V$  tal que

$$a(u, v) = f(v) \quad (14)$$

para todo  $v \in V$ , onde  $V$  é um espaço de Hilbert e, a forma bilinear  $a(.,.)$  e, a forma linear  $f$ , satisfazem as hipóteses do Lema de Lax-Milgram.

O método de Galerkin, para encontrar uma solução discreta do problema (14), consiste em definir um problema semelhante em um subespaço de dimensão finita  $V_h$  do espaço de Hilbert  $V$ . Mais especificamente, para cada subespaço  $V_h$ , associamos o problema discreto:

encontrar  $u_h \in V_h$  tal que

$$a(u_h, v_h) = f(v_h) \quad (15)$$

para todo  $v_h \in V_h$ .

Aplicando o Lema de Lax-Milgram concluímos que o problema (15) possui uma única solução  $u_h$ , que é denominada solução discreta do problema (14).

## CONSIDERAÇÕES GERAIS SOBRE CONVERGÊNCIA

Vamos estudar o caso em que estamos considerando uma família de problemas discretos. Mais especificamente, no caso do método de elementos finitos, consideramos uma família  $(V_h)_h$  de subespaços de dimensão finita do espaço  $V$ , onde o parâmetro  $h$  define esta família e  $h$  tem limite zero.

Devemos verificar a convergência das soluções discretas  $u_h$  dos problemas discretos (15) associados a cada subespaço  $V_h$  da família  $(V_h)_h$ , isto é, devemos assegurar que

$$\lim_{h \rightarrow 0} \|u - u_h\| = 0$$

Vamos dar condições suficientes para a convergência dos problemas discretos, e um primeiro resultado neste sentido é o teorema de estimativa do erro  $\|u - u_h\|_V$ .

## TEOREMA 1.3 (Lema de Cêa)

Existe uma constante  $C$  independente da escolha do subespaço  $V_h$ , tal que

$$\|u - u_h\|_V \leq C \inf_{v_h \in V_h} \{ \|u - v_h\|_V \}. \quad (16)$$

DEM: Seja  $w_h$  um elemento de  $V_h$ , de (14) e (15), temos

$$a(u, w_h) = f(w_h)$$

$$a(u_h, w_h) = f(w_h) \quad ,$$

obtendo

$$a(u - u_h, w_h) = 0 \quad ,$$

então, para cada  $v_h \in V_h$ , e do fato que  $a(.,.)$  é  $V$ -elítica e contínua, temos

$$\begin{aligned} \alpha \|u - u_h\|_V^2 &\leq a(u - u_h, u - u_h) \\ &= a(u - u_h, u - v_h) \leq M \|u - u_h\| \|u - v_h\| \end{aligned}$$

logo

$$\|u - u_h\| \leq \frac{M}{\alpha} \|u - v_h\|$$

assim, podemos concluir que

$$\|u - u_h\| \leq C \inf_{v_h \in V_h} \{ \|u - v_h\| \}$$

com  $C = \frac{M}{\alpha}$  .

c.q.d

Consequentemente, uma condição suficiente para convergência é que exista uma família  $(V_h)_h$  de subespaços de  $V$  tal que, para cada  $u \in V$

$$\lim_{h \rightarrow 0} \{ \inf_{v_h \in V_h} \{ \| u - v_h \| \} \} = 0 .$$

A desigualdade (16) mostra que o problema da estimativa do erro  $\| u - u_h \|$  se reduz a um problema da teoria de aproximação: determinar a distância

$$d(u, V_h) = \inf_{v_h \in V_h} \{ \| u - v_h \| \} ,$$

entre a função  $u \in V$  e o subespaço  $V_h \subset V$ .

No caso em que  $a(.,.)$  é uma forma bilinear simétrica, a solução discreta do problema (14) é caracterizada pelo seguinte problema de minimização,

$$J[u_h] = \min_{v_h \in V_h} \{ J[v_h] \} \quad (17)$$

onde o funcional  $J:V \longrightarrow \mathbb{R}$  é dado por

$$J[v] = a(v,v) - 2 f(v),$$

esta caracterização para a solução discreta é conhecida como o Método de Rayleigh-Ritz.

Neste caso, podemos dar a seguinte interpretação para a solução discreta: desde que

$$a(u-u_h, w_h) = 0$$

para todo  $w_h \in V_h$ , segue-se que  $u_h$  é a projeção sobre  $V_h$  da solução exata  $u \in V$  do problema (14), com respeito ao produto interno definido pela forma bilinear simétrica  $a(.,.)$ .

Além disso, dos seguintes fatos

$$a(u-u_h, u-u_h) = \inf_{v_h \in V_h} \{a(u-v_h, u-v_h)\}$$

e,  $a(.,.)$  uma forma bilinear contínua e  $V$ -elítica, podemos deduzir que

$$\|u-u_h\|_V \leq (M/\alpha)^{1/2} \inf_{v_h \in V_h} \{\|u-v_h\|_V\}.$$

Assim, concluímos que a solução discreta  $u_h$  é limitada, independentemente da escolha do subespaço  $V_h$ , que é uma condição para a estabilidade absoluta, isto é,

$$\begin{aligned} \alpha \| u_h \|_V^2 &\leq a(u_h, u_h) = f(u_h) \\ &\leq |f(u_h)| \leq \| f \|_* \| u_h \|_V \end{aligned}$$

portanto,

$$\| u_h \|_V \leq \frac{1}{\alpha} \| f \|_* \quad ,$$

o que prova a estabilidade absoluta.

Vamos fazer uma rápida análise de como o problema discreto (15) é resolvido na prática: Seja  $\{\phi_j\}_1^n$  uma base para o subespaço  $V_h$ , isto é,  $V_h = \text{span} \{\phi_j\}$ , então a solução discreta  $u_h \in V_h$  é escrita na forma

$$u_h = \sum_{j=1}^n \alpha_j \phi_j \quad ,$$

assim, o problema discreto (15) fica dado por

$$\sum_{j=1}^n a(\phi_i, \phi_j) \alpha_j = f(\phi_i) \quad (18)$$

para  $i = 1, \dots, n$ .

Temos que (18) é um sistema linear de  $n$  equações nas incógnitas  $\alpha_j$ , onde a matriz dos coeficientes  $A = [a_{ij}]$  é definida por

$$a_{ij} = a(\phi_i, \phi_j) \quad , \quad i, j=1, \dots, n \quad ,$$

e o vetor dos termos independentes  $b = (b_1, \dots, b_n)^T$  é definido como

$$b_i = f(\phi_i) \quad , \quad i=1, \dots, n \quad .$$

No caso em que a forma bilinear  $a(.,.)$  é simétrica e  $V$ -elítica, a matriz do sistema é simétrica e definida-positiva, o que implica que o sistema linear (18) possui solução única e, sua solução numérica pode ser dada pelo método de Decomposição de Cholesky sem pivotamento.

### 1.3 APLICAÇÃO DO MÉTODO DE RAYLEIGH-RITZ

Para um melhor entendimento do que foi exposto, vamos considerar a aplicação do método de Rayleigh-Ritz, para encontrarmos a solução discreta do seguinte problema de valores de contorno

$$Lu(x) \equiv -u''(x) + p(x)u(x) = f(x) \quad (19)$$

$$u(0) = u(1) = 0 \quad , \quad (20)$$

onde as funções  $f(x)$  e  $p(x)$  são contínuas em  $[0,1]$ , e  $p(x) > 0$  para todo  $x \in [0,1]$ .

Vamos considerar o operador diferencial linear de segunda ordem  $L$ , definido de  $V$  em  $V$ , onde  $V$  é um espaço de Hilbert munido do seguinte produto interno

$$\langle f, g \rangle = \int_0^1 f(x) g(x) dx$$

e consideramos

$$V = H_0^1([0,1]) = \{ v \in H^1([0,1]) \mid v(0) = v(1) = 0 \} . \quad (21)$$

Vamos definir uma forma bilinear  $a(.,.): V \times V \longrightarrow \mathbb{R}$  por

$$a(u, v) = \langle Lu, v \rangle , \quad (22)$$

e uma forma linear  $f: V \longrightarrow \mathbb{R}$  como

$$f(v) = \langle f, v \rangle , \quad (23)$$

desde que o operador  $L$  é simétrico e definido-positivo em  $V$ , a forma bilinear  $a(.,.)$  definida em (22), define um produto interno energia em  $V$ , e uma norma energia associada a esse produto interno, dada por

$$\|v\|_{\mathcal{L}} = [a(v,v)]^{1/2} .$$

Consideramos o seguinte problema abstrato: encontrar uma função  $u \in V$  que satisfaça

$$a(u,v) = f(v) \quad , \quad (24)$$

para todo  $v \in V$ .

Claramente, se  $u$  é uma solução do problema (19),  $Lu = f$ , então  $u$  também satisfaz o problema (24),  $\langle Lu, v \rangle = \langle f, v \rangle$  para todo  $v \in V$ .

Dizemos que  $u$  é uma solução fraca do problema (19) se  $u \in H_0^1([0,1])$  e satisfaz (24) e,  $u$  é uma solução clássica se  $u \in C^2([0,1])$  e satisfaz (24). Se as funções  $p(x)$  e  $f(x)$  possuem certas condições de regularidade, então toda solução fraca é uma solução clássica.

É fácil mostrar que a forma bilinear  $a(.,.)$  é contínua, simétrica e  $V$ -elítica e, que a forma linear  $f(.)$  é contínua, assim pela aplicação do Teorema 1.1 temos que existe uma única função  $u \in V$  que satisfaz o problema abstrato (24), além disso, a função  $u$  minimiza o funcional  $J:V \longrightarrow \mathbb{R}$  definido por

$$J[v] = a(v,v) - 2f(v) \quad . \quad (25)$$

Vamos encontrar uma solução discreta para o problema (19) e

que satisfaça a condição de contorno (20). Para isso definimos um subespaço de dimensão finita  $V_h$  do espaço  $V$ , gerado pelas funções  $\{\phi_j\}_{j=1}^n$ , que satisfazem as seguintes condições:

$$i. \quad \phi_j(X_i) = \delta_{ij}$$

onde  $\pi: 0 = X_1 < X_2 < \dots < X_n = 1$  é uma partição regular do intervalo  $[0,1]$ , isto é,  $X_{i+1} - X_i = h$ ,

ii. as funções  $\phi_j(X)$  satisfazem às condições de contorno.

Assim, a solução discreta  $u_h \in V_h$  é escrita na forma

$$u_h(X) = \sum_{j=1}^n \alpha_j \phi_j(X) \quad (26)$$

e ao problema abstrato (24), associamos o seguinte problema discreto

$$a(u_h, v_h) = f(v_h) \quad (27)$$

para toda  $v_h \in V_h$ , particularmente, temos

$$a(u_h, \phi_i) = f(\phi_i) \quad (28)$$

para  $i = 1, \dots, n$ .

Caracterizando a solução discreta  $u_h \in V_h$  pelo método de

Rayleigh-Ritz, temos

$$J[u_h] = \min_{v_h \in V_h} \{J[v_h]\} \quad . \quad (29)$$

O problema discreto (28) pode ser reescrito da seguinte forma

$$\sum_{j=1}^n \langle L\phi_j, \phi_i \rangle \alpha_j = \langle f, \phi_i \rangle \quad , \quad (30)$$

para  $i = 1, \dots, n$ .

Assim, a solução discreta  $u_h \in V_h$  fica determinada pela resolução do sistema linear (30), onde a matriz do sistema é definida por

$$a_{ij} = \langle L\phi_j, \phi_i \rangle = \int_0^1 (\phi_i'(x) \phi_j'(x) + p(x) \phi_i(x) \phi_j(x)) dx \quad (31)$$

e o vetor dos termos independentes é dado por

$$b_i = \langle f, \phi_i \rangle = \int_0^1 f(x) \phi_i(x) dx \quad . \quad (32)$$

Podemos observar que o funcional  $J: V_h \longrightarrow \mathbb{R}$  fica sendo uma função real nas variáveis  $\beta_1, \dots, \beta_n$ , assim o problema de minimização (29) fica reescrito na forma

$$J[\alpha_1, \dots, \alpha_n] = \min_{\beta \in \mathbb{R}^n} \{J[\sum_{j=1}^n \beta_j \phi_j(x)]\} \quad , \quad (33)$$

com  $J[\beta_1, \dots, \beta_n]$  uma forma quadrática, assim para obtermos seu ponto de mínimo, basta derivarmos parcialmente com relação às variáveis  $\beta_j$  e igualar os resultados a zero.

#### 1.4 UM PROBLEMA NÃO-LINEAR

Consideramos a equação diferencial não-linear de segunda ordem

$$-u''(x) + p(x) u'(x) + u(x) = f(x) \quad (34)$$

com a condição de contorno homogênea

$$u(0) = u(1) = 0 \quad . \quad (35)$$

Se  $u$  é uma solução de (34), então temos a seguinte relação

$$\int_0^1 u'(x) v'(x) dx + \int_0^1 p(x) u'(x) u(x) v(x) dx = \int_0^1 f(x) v(x) dx \quad (36)$$

para toda função  $v \in H_0^1([0,1])$  .

Quando as funções  $f(x)$  e  $p(x)$  possuem certas condições de regularidade, temos que uma solução fraca é uma solução clássica, e podemos demonstrar que a equação (34) possui uma única solução fraca.

Vamos procurar uma solução discreta para o problema de valores de contorno não linear (34) - (35). Para isso, vamos definir um subespaço de dimensão finita  $V_h$  de  $H_0^1([0,1])$ , gerado pelas funções  $\{\phi_j\}$ , que satisfazem as condições (i) e (ii) definidas acima.

A solução discreta  $u_h \in V_h$  é dada na forma

$$u_h(x) = \sum_{j=1}^n \alpha_j \phi_j(x) \quad , \quad (37)$$

e, ao problema (36), associamos o seguinte problema discreto

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^n \alpha_j \int_0^1 \phi_i'(x) \phi_j'(x) dx + \sum_j^n \sum_k^n \alpha_j \alpha_k \int_0^1 p(x) \phi_i(x) \phi_j'(x) \phi_k(x) dx \\ = \int_0^1 f(x) \phi_i(x) dx \end{aligned} \quad (38)$$

para  $i = 1, \dots, n$  .

Temos que (38) é um sistema não-linear com  $n$  equações nas incógnitas  $\alpha_j$  para  $j = 1, \dots, n$  .

Vamos definir os seguintes vetores:

$$H_i(\alpha) = \sum_j^n \sum_k^n \alpha_j \alpha_k \int_0^1 p(x) \phi_i(x) \phi_j'(x) \phi_k(x) dx \quad (39)$$

$$F_i = \int_0^1 f(x) \phi_i(x) dx \quad , \quad (40)$$

para  $i = 1, \dots, n$  ,

e a matriz  $K = [k_{ij}]$  com

$$K_{ij} = \int_0^1 \phi_i'(x) \phi_j'(x) dx \quad (41)$$

para  $i, j = 1, \dots, n$ . Desse modo, o sistema não-linear (38) pode ser representado na seguinte forma

$$[K] \cdot \vec{\alpha} + \vec{H}(\alpha) - \vec{F} = 0 \quad , \quad (42)$$

onde  $\vec{\alpha} = (\alpha_1, \dots, \alpha_n)^T \in \mathbb{R}^n$ , ou em uma forma compacta

$$P(\alpha) = 0 \quad . \quad (43)$$

Vamos resolver o sistema não-linear (42) pelo método de Newton,

$$P'(\alpha^n) \cdot \Delta\alpha = -P(\alpha^n) \quad , \quad (44)$$

onde  $\Delta\alpha = \alpha^{n+1} - \alpha^n$  e  $P'(\alpha)$  é o Jacobiano do sistema (42).

O Jacobiano do sistema é dado por

$$P'(\alpha) = \frac{\partial (P_1, \dots, P_n)}{\partial (\alpha_1, \dots, \alpha_n)} = \frac{\partial P_i}{\partial \alpha_\ell}$$

para  $i, \ell = 1, \dots, n$ , com

$$\frac{\partial P_i}{\partial \alpha_\ell} = K_{i\ell} + \frac{\partial H_i}{\partial \alpha_\ell} \quad , \quad (45)$$

onde

$$\begin{aligned} \frac{\partial H_i}{\partial \alpha_\ell} = & \sum_{k=1}^n \alpha_k \int_0^1 p(x) \phi_i(x) \phi'_\ell(x) \phi_k(x) dx + \\ & + \sum_{j=1}^n \alpha_j \int_0^1 p(x) \phi_i(x) \phi'_j(x) \phi_\ell(x) dx, \end{aligned}$$

para  $\ell, i=1, \dots, n$  .

## CAPÍTULO II

### IMPLEMENTAÇÃO DO MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS

Para um melhor entendimento do método de elementos finitos e da sua implementação computacional, vamos tomar como exemplo a equação diferencial linear de segunda ordem

$$Lu(x) \equiv -u''(x) + p(x)u(x) = f(x) \quad (1)$$

sujeita à condição de contorno

$$u(0) = u(1) = 0 \quad , \quad (2)$$

onde as funções  $f(x)$  e  $p(x)$  são contínuas em  $[0,1]$  e,  $p(x) > 0$  para todo  $x \in [0,1]$ .

Vamos considerar

$$V = H_0^1([0,1]) = \{v \in H^1([0,1]) \mid v(0) = v(1) = 0\} \quad , \quad (3)$$

o subespaço linear de  $H^1([0,1])$  que possui a solução do nosso problema e, definimos em  $V$  o seguinte produto interno

$$\langle f, g \rangle = \int_0^1 f(x) g(x) dx$$

para toda  $f, g \in V$ .

O operador  $L$  é simétrico em  $V$ . De fato, para toda  $f, g \in V$ , temos

$$\begin{aligned} \langle Lf, g \rangle &= \int_0^1 [-f''(x) + p(x) f(x)] g(x) dx \\ &= -\int_0^1 f''(x) g(x) dx + \int_0^1 p(x) f(x) g(x) dx \end{aligned}$$

integrando por partes, obtemos

$$\begin{aligned} -\int_0^1 f''(x) g(x) dx &= -f'(x)g(x) \Big|_0^1 + \int_0^1 f'(x) g'(x) dx \\ &= \int_0^1 f'(x) g'(x) dx \end{aligned}$$

portanto,

$$\begin{aligned} \langle Lf, g \rangle &= \int_0^1 [f'(x)g'(x) + p(x) f(x)g(x)] dx \\ &= \langle f, Lg \rangle \end{aligned} \quad (4)$$

Desde que  $p(x) > 0$  para todo  $x \in [0, 1]$ , temos que  $L$  é um operador definido-positivo em  $V$ , de fato, para toda  $v \in V$ , tem-se que

$$\langle Lv, v \rangle = \int_0^1 [v'(x)]^2 dx + \int_0^1 p(x) [v(x)]^2 dx$$

$$\int_0^1 p(x) [v(x)]^2 dx > \alpha \|v\|_V^2, \quad ,$$

onde  $\alpha = \min_{x \in [0,1]} \{p(x)\}$  .

Como  $L$  é um operador linear definido-positivo e simétrico em  $V$ , temos que o problema abstrato: encontrar  $u \in V$  que satisfaça

$$\langle Lu, v \rangle = \langle f, v \rangle \quad (5)$$

para toda  $v \in V$ , possui solução única (Teorema 1.1).

Vamos utilizar o método de Galerkin para encontrar uma solução discreta do problema (5), para isso, vamos definir um subespaço de dimensão finita  $V_h$  do espaço  $V$ , constituído das funções polinômiais por partes de Hermite cúbicas, isto é,

$$V_h = \text{span} \left\{ \begin{matrix} \phi(x) \\ 01 \end{matrix}, \dots, \begin{matrix} \phi(x) \\ 0n \end{matrix}, \begin{matrix} \phi(x) \\ 11 \end{matrix}, \dots, \begin{matrix} \phi(x) \\ 1n \end{matrix} \right\} ,$$

e, a  $V_h$  associamos o problema discreto: encontrar  $u_h \in V_h$  tal que

$$\langle Lu_h, v_h \rangle = \langle f, v_h \rangle \quad (6)$$

para toda  $v_h \in V_h$ , em particular, temos

$$\langle Lu_h; \phi_{ki} \rangle = \langle f, \phi_{ki} \rangle \quad (7)$$

para  $i = 1, \dots, n$  e  $k = 0, 1$ ,  $u_h \in V_h$  é escrita na forma

$$u_h(x) = \sum_{j=1}^n \alpha_j \phi_{0j}(x) + \sum_{j=1}^n \beta_j \phi_{1j}(x) \quad (8)$$

As funções  $\phi_{0i}(x)$  e  $\phi_{1i}(x)$  são definidas por:

$$\phi_{0i}(x) = \begin{cases} (x-x_{i-1})^2 \cdot [h + 2(x-x_i)]/h^3 & , \quad x_{i-1} \leq x \leq x_i \\ (x-x_{i+1})^2 \cdot [h + 2(x-x_i)]/h^3 & ; \quad x_i \leq x \leq x_{i+1} \end{cases}$$

para  $i = 2, \dots, (n-1)$

$$\phi_{1i}(x) = \begin{cases} (x-x_{i-1})^2 \cdot (x-x_i)/h^2 & , \quad x_{i-1} \leq x \leq x_i \\ (x-x_i) \cdot (x-x_{i+1})^2/h^2 & ; \quad x_i \leq x \leq x_{i+1} \end{cases}$$

para  $i = 2, \dots, (n-1)$

$$\phi_{01}(x) = \begin{cases} (x-x_2)^2 \cdot [h + 2(x-x_1)]/h^3 & ; \quad x_1 \leq x \leq x_2 \\ 0 & ; \quad x_2 \leq x \leq x_n \end{cases}$$

$$\phi_{0n}(x) = \begin{cases} (x-x_{n-1})^2 \cdot [h + 2(x-x_n)]/h^3 & ; \quad x_{n-1} \leq x \leq x_n \\ 0 & ; \quad x_1 \leq x \leq x_{n-1} \end{cases}$$

$$\phi_{11}(x) = \begin{cases} (x-x_1) \cdot (x-x_2)^2/h^2 & ; \quad x_1 \leq x \leq x_2 \\ 0 & ; \quad x_2 \leq x \leq x_n \end{cases}$$

$$\phi_{1n}(x) = \begin{cases} (x-x_{n-1}) (x-x_n)^2/h^2 & ; \quad x_{n-1} \leq x \leq x_n \\ 0 & ; \quad x_1 \leq x \leq x_{n-1} \end{cases}$$

com  $\pi: 0 = x_1 < x_2 < \dots < x_n = 1$  uma partição regular do intervalo  $[0,1]$ , isto é,  $x_{i+1} - x_i = h$ .

As funções  $\phi_{0i}(x)$  e  $\phi_{1i}(x)$  possuem as seguintes configurações

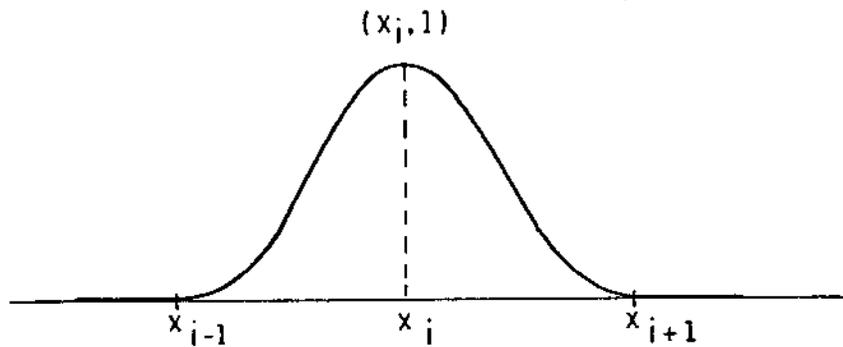
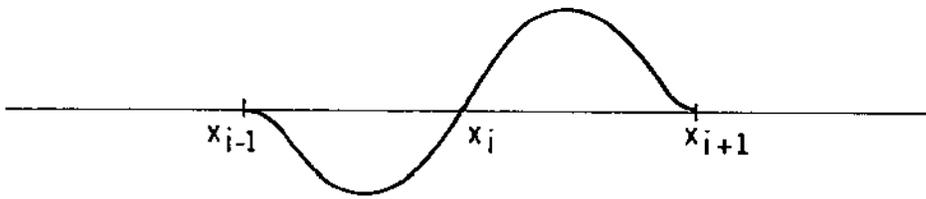


Fig. 2.1 Gráfico  $\phi_{0i}(x)$ ,  $2 \leq i \leq (n-1)$

Fig. 2.2 Gráficos de  $\Phi_{01}(x)$  e  $\Phi_{0n}(x)$ Fig. 2.3 Gráfico  $\Phi(x)$ ,  $2 \leq i \leq (n-1)$ Fig. 2.4 Gráficos de  $\Phi_{11}(x)$  e  $\Phi_{1n}(x)$

Neste caso, as funções da base possuem as seguintes propriedades:

$$\left\{ \begin{array}{l} \phi_{0i}(x_j) = \delta_{ij} \\ \phi'_{0i}(x_j) = 0 \end{array} \right. \quad i, j = 1, \dots, n$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \phi_{1i}(x_j) = 0 \\ \phi'_{1i}(x_j) = \delta_{ij} \end{array} \right. \quad i, j = 1, \dots, n$$

Por simplicidade, vamos reenumerar as funções da base do seguinte modo

$$\phi_{0i}(x) = \phi_{2i-1}(x)$$

$$\phi_{1i}(x) = \phi_{2i}(x)$$

para  $i = 1, \dots, n$ . Assim, a solução discreta  $u_h \in V_h$  fica reescrita como

$$u_h(x) = \sum_{j=1}^{2n} \alpha_j \phi_j(x) \quad , \quad (9)$$

e o problema discreto (7) pode ser escrito como

$$\langle Lu_h, \phi_i \rangle = \langle f, \phi_i \rangle \quad , \quad (10)$$

para  $i = 1, \dots, 2n$ .

Substituindo (9) em (10), temos

$$\sum_{j=1}^{2n} \alpha_j \langle L\phi_j, \phi_i \rangle = \langle f, \phi_i \rangle \quad , \quad (11)$$

para  $i = 1, \dots, 2n$ , onde

$$\langle L\phi_j, \phi_i \rangle = \int_0^1 \phi_i'(x) \phi_j'(x) dx + \int_0^1 p(x) \phi_i(x) \phi_j(x) dx$$

$$\langle f, \phi_i \rangle = \int_0^1 f(x) \phi_i(x) dx.$$

Temos que, (11) é um sistema linear de  $2n$  equações nas incógnitas  $\alpha_j$ . Vamos definir as seguintes matrizes

$$K_{ij} = \int_0^1 \phi_i'(x) \phi_j'(x) dx \quad , \quad (12)$$

$$M_{ij} = \int_0^1 p(x) \phi_i(x) \phi_j(x) dx \quad (13)$$

para  $i, j = 1, \dots, 2n$ , e o vetor

$$F_i = \int_0^1 f(x) \phi_i(x) dx \quad , \quad i = 1, \dots, 2n, \quad (14)$$

desse modo o sistema linear (11) pode ser escrito na forma matricial

$$A \cdot \vec{\alpha} = \vec{F} \quad , \quad (15)$$

com  $\vec{\alpha} = (\alpha_1, \dots, \alpha_{2n})^T \in \mathbb{R}^{2n}$  , e a matriz  $A = [K_{ij} + M_{ij}]$  é denominada matriz de rigidez.

Como o suporte das funções da base, isto é,

$$\text{spt}\phi_i = \{x \in [0,1] / \phi_i(x) \neq 0\}$$

possui medida igual a  $2h$ , temos que a matriz de rigidez é uma matriz esparsa e, no caso em que usamos como base para o espaço de aproximações as funções de Hermite cúbicas, a matriz de rigidez possui uma estrutura tridiagonal por blocos. Assim, podemos resolver o sistema linear (11) pelo método de decomposição de Choleky, para sistemas tridiagonais por blocos.

Para construirmos a matriz de rigidez, vamos introduzir a noção de submatriz de rigidez.

#### Submatriz de Rigidez

Seja  $\pi: 0=x_1 < x_2 < \dots < x_n = 1$  uma partição regular do intervalo  $[0,1]$ , isto é,  $x_{i+1} - x_i = h$ . Vamos definir a base para o espaço de aproximações  $V_h$  em cada elemento  $[x_i, x_{i+1}]$  para  $i=1, \dots, (n-1)$ , a partir de uma nova enumeração das funções de Hermite cúbicas. Definimos as funções da base da seguinte forma

$$\phi_1(x) = (x-x_{i+1})^2 \cdot [h + 2(x-x_i)]/h^3$$

$$\phi_2(x) = (x-x_i) \cdot (x-x_{i+1})^2/h^2$$

$$\phi_3(x) = (x-x_i)^2 \cdot [h - 2(x-x_{i+1})]/h^3$$

$$\phi_4(x) = (x-x_i)^2 \cdot (x-x_{i+1})/h^2$$

para  $x_i \leq x \leq x_{i+1}$  e  $i = 1, \dots, (n-1)$ , assim temos as seguintes configurações:

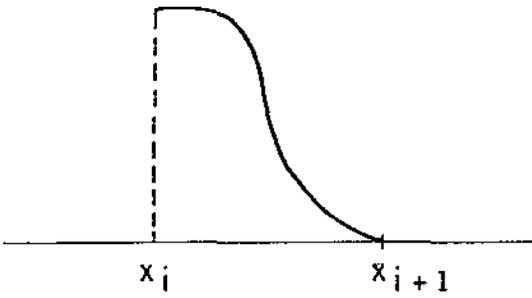


Fig. 2.5 Gráfico  $\phi_1(x)$

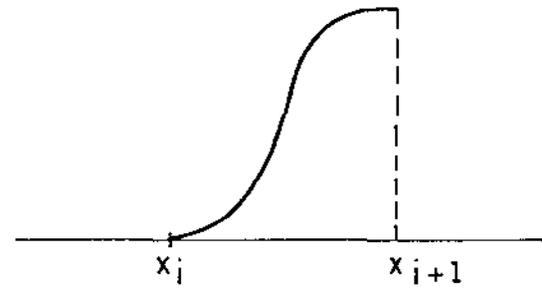


Fig. 2.6 Gráfico  $\phi_3(x)$

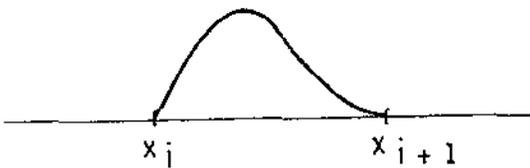


Fig. 2.7 Gráfico  $\phi_2(x)$

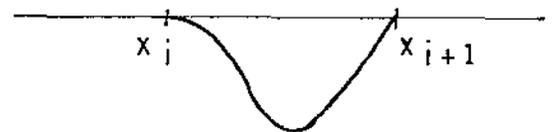


Fig. 2.8 Gráfico  $\phi_4(x)$

Com essa nova enumeração das funções da base para o espaço de aproximações, em cada elemento  $[X_k, X_{k+1}]$ , definimos as seguintes matrizes elementares a partir de (12) e (13);

$$K_{ij}^k = \int_{X_k}^{X_{k+1}} \phi_i'(x) \phi_j'(x) dx \quad (16)$$

$$M_{ij}^k = \int_{X_k}^{X_{k+1}} p(x) \phi_i(x) \phi_j(x) dx \quad (17)$$

para  $i, j=1, \dots, 4$ . e o vetor elementar

$$F_i^k = \int_{X_k}^{X_{k+1}} f(x) \phi_i(x) dx \quad , \quad i=1, \dots, 4 \quad , \quad (18)$$

onde  $[X_k, X_{k+1}]$  é o  $K$ -ésimo elemento,  $K=1, \dots, (n-1)$ .

Com o auxílio da submatriz de rigidez definida por

$$A_{ij}^k = M_{ij}^k + K_{ij}^k \quad (19)$$

no  $K$ -ésimo elemento, vamos construir a matriz de rigidez. Para um melhor entendimento da construção da matriz de rigidez a partir das submatrizes de rigidez, vamos fazer uso das seguintes con-  
figurações:

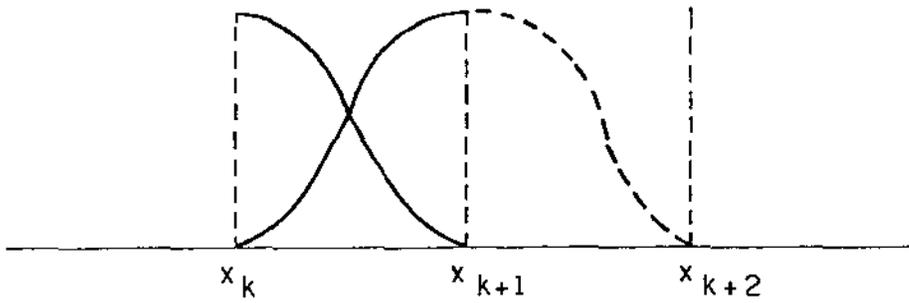


Fig. 2.9

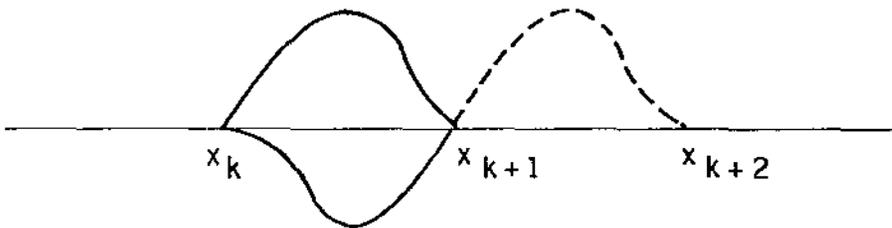


Fig. 2.10

Podemos observar que no  $(k+1)$ -ésimo nó as funções  $\phi_3(x)$  e  $\phi_4(x)$  do  $k$ -ésimo elemento, contribuem para a solução discreta juntamente com as funções  $\phi_1(x)$  e  $\phi_2(x)$ , respectivamente, do  $(k+1)$ -ésimo elemento, desse modo, a matriz de rigidez pode ser construída a partir das submatrizes de rigidez seguindo o esquema abaixo

$$A^k = \left[ \begin{array}{cccc|cc} - & - & - & - & & \\ - & - & - & - & & \\ - & - & \left[ \begin{array}{cc} + & + \\ + & + \end{array} \right] & - & - & \\ - & - & \left[ \begin{array}{cc} - & - \\ - & - \end{array} \right] & - & - & \end{array} \right] = A^{k+1}$$

para  $k = 1, 2, \dots, (n-1)$ , analogamente, o vetor  $\vec{F}$  definido em (14) é construído a partir do vetor elementar (18) da seguinte forma:

$$\vec{F} = [F_1^1, F_2^1, (F_3^1 + F_1^2), (F_4^1 + F_2^2), \dots, (F_3^{n-2} + F_1^{n-1}), (F_4^{n-2} + F_2^{n-1}), F_3^{n-1}, F_4^{n-1}]$$

Portanto, obtemos um algoritmo para construir a matriz de rigidez a partir das submatrizes de rigidez, o que facilita a implementação computacional do método de elementos finitos.

#### Efeitos da Integração Numérica

Temos que os elementos das submatrizes de rigidez são dados através de integrais e, na sua implementação computacional, vamos calcular essas integrais numericamente, portanto devemos escolher um método de integração numérica que seja o mais preciso possível, para que o erro na integração numérica não passe para a solução discreta, acumulando com os erros de arredondamento da resolução numérica do sistema linear fornecido pelo método de Galerkin, juntamente com o erro da discretização do próprio método de elementos finitos.

Como a base do espaço de aproximação  $V_h$  são as funções de Hermite cúbicas e, como vamos integrar, no máximo, produto entre as funções da base, precisamos de um método de integração numérica que seja exato para polinômios de grau menor ou igual a seis e que utilize de um menor número possível de pontos de integração, para que seja eficiente computacionalmente, portanto utili-

zamos o método de quadratura Gaussiana com quatro pontos de integração.

Para exemplificar, consideremos a submatriz de rigidez definida em (19),

$$A_{ij}^k = \int_{x_k}^{x_{k+1}} [\phi_i'(x) \phi_j'(x) + p(x) \phi_i(x) \phi_j(x)] dx$$

para  $i, j = 1, \dots, 4$ , calculada no  $K$ -ésimo elemento  $[X_k, X_{k+1}]$ , efetuando uma mudança de variável,

$$\tilde{x} = \frac{X_k + X_{k+1}}{2} + \frac{X_{k+1} - X_k}{2} t$$

para  $t \in [-1, 1]$ , obtemos

$$A_{ij}^k = \frac{X_{k+1} - X_k}{2} \cdot \int_{-1}^1 [\phi_i'(\tilde{X}) \phi_j'(\tilde{X}) + p(\tilde{X}) \phi_i(\tilde{X}) \phi_j(\tilde{X})] dt,$$

aplicando o método de quadratura Gaussiana, temos

$$A_{ij}^k = \frac{X_{k+1} - X_k}{2} \cdot \sum_{\ell=1}^4 w_{\ell} [\phi_i'(\tilde{X}_{\ell}) \cdot \phi_j'(\tilde{X}_{\ell}) + p(\tilde{X}_{\ell}) \cdot \phi_i(\tilde{X}_{\ell}) \cdot \phi_j(\tilde{X}_{\ell})]$$

$$\text{onde, } \tilde{X}_{\ell} = \frac{X_{k+1} + X_k}{2} + \frac{X_{k+1} - X_k}{2} t_{\ell}$$

com  $t_{\ell}$  os zeros do polinômio de Legendre de grau quatro e  $w_{\ell}$  os pesos do método de integração.

### Método Frontal

Como foi visto anteriormente, se o espaço de aproximação  $V_h$  for gerado pelas funções de Hermite cúbicas, tem-se que  $\dim V_h = 2N$  onde,  $N$  é o número de nós da malha e, conseqüentemente o sistema linear fornecido pelo método de Galerkin possui  $2N$  equações e uma estrutura tridiagonal por blocos. Portanto a resolução computacional desse sistema linear torna-se inconveniente para valores muito grandes de  $N$ , quando temos problemas de escassez de memória principal. Porém este problema fica resolvido quando utilizamos o Método Frontal, que vamos descrever a seguir.

Para exemplificar, consideremos a submatriz de rigidez definida em (19)

$$A_{ij}^k = \int_{X_k}^{X_{k+1}} [\phi_i'(x) \phi_j'(x) + p(x) \phi_i(x) \phi_j(x)] dx$$

e o vetor elementar definido em (18)

$$F_i^k = \int_{X_k}^{X_{k+1}} f(x) \phi_i(x) dx$$

para  $i, j = 1, \dots, 4$ ,  $[X_k, X_{k+1}]$  é o  $k$ -ésimo elemento, para  $k = 1, \dots, (N-1)$ .

Como foi observado anteriormente, no  $(k+1)$ -ésimo nó as funções  $\phi_3(x)$  e  $\phi_4(x)$  definidas no  $k$ -ésimo elemento, contribuem para a solução discreta juntamente com as funções  $\phi_1(x)$  e  $\phi_2(x)$  respectivamente, do  $(k+1)$ -ésimo elemento. Portanto, no método frontal vamos definir a submatriz de rigidez no  $(k+1)$ -ésimo elemento da seguinte forma

$$A^{k+1} = \begin{bmatrix} (A_{11}^{k+1} + A_{33}^k) & (A_{12}^{k+1} + A_{34}^k) & A_{13}^{k+1} & A_{14}^{k+1} \\ (A_{21}^{k+1} + A_{43}^k) & (A_{22}^{k+1} + A_{44}^k) & A_{23}^{k+1} & A_{24}^{k+1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ A_{41}^{k+1} & \dots & \dots & A_{44}^{k+1} \end{bmatrix}$$

e definimos o vetor elementar no  $(k+1)$ -ésimo elemento da seguinte forma

$$F^{k+1} = [(F_1^{k+1} + F_3^k), (F_2^{k+1} + F_4^k), F_3^{k+1}, F_4^{k+1}]$$

para  $k=1, \dots, (N-2)$ .

Agora, o método frontal considera a matriz ampliada  $A^k | F^k$  para  $k = 1, \dots, (N-1)$  e, fazemos a eliminação nas duas primeiras linhas, que não sofrem mais alterações e, guardamos em um arquivo de dados. No final do processo teremos no arquivo de dados o sis

tema linear (11) na forma triangular superior. O sistema triangular é resolvido lendo-se do arquivo uma linha por vez.

## CAPITULO III

### O MODELO MATEMÁTICO PARA DISPOSITIVOS SEMICONDUTORES

O modelo matemático adotado para descrever a condução elétrica nos dispositivos semicondutores, que envolve o fluxo de dois portadores de carga independentes e opostamente carregados, que são os elétrons de condução e as lacunas, consiste em um sistema de equações diferenciais parciais não lineares, composto por três equações, a saber, equação de continuidade para elétrons, equação de continuidade para lacunas e a equação de Poisson que relaciona a carga total com o potencial eletrostático. E fazemos uso de duas equações auxiliares que são, densidade de corrente para elétrons e densidade de corrente para lacunas.

Para descrever as equações de continuidade e a equação de Poisson, vamos considerar que as concentrações de elétrons e lacunas são funções da variável espacial  $x = (x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3$  e da variável tempo, isto é, temos  $n(x, t)$  e  $p(x, t)$ .

A velocidade de variação das concentrações de portadores de carga é expressa mediante a equação de continuidade dos portadores:

Equação de Continuidade para Elétrons

$$\frac{\partial n(x, t)}{\partial t} = \frac{1}{q} \operatorname{div} \vec{J}_n(x, t) + G(x) - R(n, p) \quad (1)$$

Equação de Continuidade para Lacunas

$$\frac{\partial p(x,t)}{\partial t} = -\frac{1}{q} \operatorname{div} \vec{J}_p(x,t) + G(x) + R(n,p) \quad (2)$$

Equação de Poisson

$$\epsilon \operatorname{div} \operatorname{grad} \psi(x,t) = q (n(x,t) - p(x,t) - N_D(x)) \quad (3)$$

Equações Auxiliares

Densidade de Corrente para Elétrons

$$\vec{J}_n(x,t) = q(\mu_n n(x,t) \vec{E}(x,t) + D_n \operatorname{grad} n(x,t)) \quad (4)$$

Densidade de Corrente para Lacunas

$$\vec{J}_p(x,t) = q (\mu_p p(x,t) \vec{E}(x,t) - D_p \operatorname{grad} p(x,t)) \quad (5)$$

As equações (1) e (2) expressam as velocidades de variação do número de portadores de carga devido aos processos de geração e recombinação, assim como devido a existência da difusão e deriva dos portadores de carga. O termo  $G(x)$  representa a geração de pares elétrons-lacunas devido aos processos térmicos e as ações externas, por exemplo, a radiação de uma fonte de luz. O termo  $R(n,p)$  representa a taxa de recombinação de pares elétrons-lacuna,

que tem por objetivo restaurar o estado de equilíbrio.

A equação (3) nos fornece um balanço da densidade de carga, onde a função  $N_D(x)$ , que depende somente da variável espacial, representa a densidade de impureza ionizada no material semicondutor intrínseco, isto é,

$$N_D(x) = N_d(x) - N_a(x)$$

onde  $N_d(x)$  é a densidade de íons doadores imóveis, devido a ionização de átomos de impureza doadora que produz elétrons de condução e cargas iônicas positivas imóveis,  $N_a(x)$  é a densidade de íons aceitadores imóveis, devido a ionização de átomos de impureza aceitadora que produz lacunas e cargas iônicas negativas imóveis.

Nas equações auxiliares (4) e (5) o primeiro termo corresponde a uma densidade de corrente associada à deriva, devido a um campo elétrico externo  $e$ , o segundo termo corresponde a uma densidade de corrente associada à difusão, devido a um gradiente de concentração dos portadores de carga. Há muitas situações em que um campo elétrico e gradiente de concentração de portadores estão presentes, simultaneamente, em um semicondutor. Para situações que se afastam pouco do equilíbrio, é razoável supor que a densidade total de corrente de elétrons, ou de lacunas, seja uma combinação linear de duas componentes de densidade de corrente - uma produzida por deriva e outra por difusão. Assim, a densidade de corren-

te de elétrons e a densidade de corrente de lacunas resultantes podem ser descritas pelas equações (4) e (5). Tal descrição do movimento de elétrons e de lacunas em situação de desequilíbrio, em termos de uma combinação de deriva e difusão, pode ser justificada em detalhes usando conceitos e técnicas da mecânica estatística, mas vamos adotar como sendo um postulado, a descrição feita acima das correntes de elétrons e lacunas, inclusive as definições de mobilidade e difusão.

Tanto a difusão como a deriva são manifestações do movimento térmico aleatório dos portadores de carga. Conseqüentemente, a mobilidade  $\mu$  e o coeficiente de difusão  $D$  não são independentes. Mais precisamente, entre eles existem as relações

$$\frac{D_p}{\mu_p} = \frac{KT}{q} \quad (6)$$

$$\frac{D_n}{\mu_n} = \frac{KT}{q} \quad (7)$$

Estas equações são conhecidas como relações de Einstein. A constante de proporcionalidade  $KT/q$ , que tem unidade de tensão, é denominada tensão térmica. Os fatores que aparecem na tensão térmica são:

$$K = \text{constante de Boltzmann (Joule/}^{\circ}\text{K)}$$

$q$  = carga do elétron (Coul)

$T$  = Temperatura absoluta ( $^{\circ}\text{K}$ ) ,

em temperaturas próximas da temperatura ambiente normal, a tensão térmica vale cerca de 25 mV.

As relações de Einstein podem ser inteiramente justificadas se forem consideradas as implicações da mecânica estatística para a situação de equilíbrio, em um semicondutor dopado não uniformemente. De acordo com a orientação anterior, adotaremos tais relações como postulados.

Substituindo as equações auxiliares (4) e (5) nas equações de continuidade (1) e (2) e dando condições iniciais e de fronteira, temos o seguinte Problema de Valor Inicial e de Fronteira para Dispositivos Semicondutores:

equação de continuidade para elétrons

$$\frac{\partial n(x,t)}{\partial t} = D_n \operatorname{div} \operatorname{grad} n - \mu_n \operatorname{div}(n \operatorname{grad} \psi) + G(x) + R(n,p) \quad (8)$$

equação de continuidade para lacunas

$$\frac{\partial p(x,t)}{\partial t} = D_p \operatorname{div} \operatorname{grad} p + \mu_p \operatorname{div}(p \operatorname{grad} \psi) + G(x) + R(n,p) \quad (9)$$

equação de Poisson

$$\varepsilon \operatorname{div} \operatorname{grad} \psi(x,t) = q(n(x,t) - p(x,t) - N_D(x)) \quad , \quad (10)$$

as funções  $n$ ,  $p$  e  $\psi$  são definidas em  $\Omega \times (0,T)$ , onde  $\Omega$  é um aberto de  $\mathbb{R}^3$  com bordo regular  $\partial\Omega$  e,  $N_D(x)$  é uma função definida somente em  $\Omega$ , Hölder contínua.

Condições de Fronteira

$$\text{as funções } n, p \text{ e } \psi \text{ são especificadas em } \partial\Omega_1 \times (0,T) \quad , \quad (11)$$

$$\vec{n} \cdot \operatorname{grad} n(x,t) = \vec{n} \cdot \operatorname{grad} p(x,t) = \vec{n} \cdot \operatorname{grad} \psi(x,t) = 0 \quad (12)$$

em  $\partial\Omega_2 \times (0,T)$  ,

onde  $\vec{n}$  é o versor normal ao bordo  $\partial\Omega_2$  e supomos que o bordo  $\partial\Omega$  pode ser representado na forma  $\partial\Omega = \partial\Omega_1 \cup \partial\Omega_2$ .

Condições Iniciais

$$n(x,0) = n_0(x) \quad \text{e} \quad p(x,0) = p_0(x) \quad (13)$$

para  $x \in \Omega$ , as funções  $n_0(x)$  e  $p_0(x)$  são de classe  $C^2(\Omega)$  e estritamente positivas, satisfazendo as condições de fronteira (11) e (12).

Para um dispositivo semiconductor, uma junção, por exemplo, a condição de fronteira (11) nos diz que as densidades de elétrons e lacunas e o potencial eletrostático são especificados nos contatos ( $\partial\Omega_1$ ) e, a condição de fronteira (12) nos dá uma condição de isolamento das partes do bordo entre os contatos ( $\partial\Omega_2$ ).

Neste trabalho de tese vamos assumir as seguintes hipóteses simplificadoras:

- i. consideramos o dispositivo semiconductor em regime permanente e unidimensional,
- ii. desprezamos os efeitos térmicos, isto é, vamos trabalhar na temperatura ambiente  $T \cong 300 \text{ } ^\circ\text{K}$ ,
- iii. como o objetivo do trabalho é simular uma junção pn, podemos considerar ausente o termo de geração de portadores de carga devido uma radiação externa,
- iv. consideramos constante os coeficientes de difusão e os coeficientes de mobilidade,
- v. o termo de recombinação será expresso da seguinte forma

$$R(n) = - \frac{(n(x) - n_0)}{\tau_n} \quad (14)$$

$$R(p) = - \frac{(p(x) - p_0)}{\tau_p} \quad (15)$$

onde,  $n_0$  = densidade de elétrons em equilíbrio,

$p_0$  = densidade de lacunas em equilíbrio,

$\tau_n, \tau_p$  = tempo de recombinação para elétrons e lacunas respectivamente.

Portanto, o modelo matemático para descrever a condução elétrica nos dispositivos semicondutores fica descrito pelas seguintes equações:

equação de continuidade para elétrons

$$D_n n''(x) - \mu_n [n(x) \psi'(x)]' - \frac{[n(x) - n_0]}{\tau_n} = 0 \quad (16)$$

equação de continuidade para lacunas

$$D_p p''(x) + \mu_p [p(x) \psi'(x)]' - \frac{[p(x) - p_0]}{\tau_p} = 0 \quad (17)$$

equação de Poisson

$$\epsilon \psi''(x) = q [n(x) - p(x) - N_D(x)] \quad (18)$$

para  $x \in [0, a]$ .

518413C

A condição de fronteira para as densidades de elétrons e lacunas é imposta de modo que não existam portadores de carga em excesso nos contatos, isto é, estamos considerando o equilíbrio termodinâmico na fronteira. Podemos expressar esta condição da seguinte forma:

$$n(0) \cdot p(0) = n_i^2 \quad (19)$$

$$n(a) \cdot p(a) = n_i^2 \quad (20)$$

onde  $n_i$  é a densidade de portadores de carga no semiconductor intrínseco não degenerado.

#### A Normalização das Equações

Antes de dar início a uma análise do modelo é conveniente colocar as equações em uma forma não-dimensional, usando os seguintes procedimentos:

Para a variável independente  $x$  que possui uma unidade de comprimento vamos usar  $L_D$  como fator de normalização, definimos

$$x = L_D \bar{x}$$

onde  $L_D = \sqrt{\frac{\epsilon KT}{q^2 n_i}}$  é denominado comprimento de Debye. Para  $n(x)$

e  $p(x)$  que representam as densidades de elétrons e lacunas respectivamente, usaremos  $n_i$  como fator de normalização, definimos

$$n(x) = n_i \bar{n}(\bar{x})$$

$$p(x) = n_i \bar{p}(\bar{x}) \quad ,$$

analogamente para  $N_D(x)$ ,  $n_o$  e  $p_o$ , portanto temos

$$N_D(x) = n_i \bar{N}_D(\bar{x})$$

$$n_o = n_i \bar{n}_o$$

$$p_o = n_i \bar{p}_o \quad .$$

Para  $\psi(x)$  que possui uma unidade de volts usaremos a tensão térmica  $\frac{KT}{q}$  como fator de normalização,

$$\psi(x) = \frac{KT}{q} \bar{\psi}(\bar{x}) \quad ,$$

e para os tempos de recombinação  $\tau_n$  e  $\tau_p$  vamos usar a seguinte normalização

$$\tau_n = \frac{L_D^2}{D_n} \bar{\tau}_n$$

$$\tau_p = \frac{L_D^2}{D_p} \bar{\tau}_p$$

Substituindo as variáveis normalizadas nas equações (16), (17) e (18) e com uma manipulação algébrica, obtemos o modelo normalizado:

equação de continuidade para elétrons

$$\frac{d^2 \bar{n}(\bar{x})}{d\bar{x}^2} - \frac{d}{d\bar{x}} \left[ \bar{n}(\bar{x}) \frac{d\psi(\bar{x})}{d\bar{x}} \right] - \frac{1}{\bar{\tau}_n} \cdot [\bar{n}(\bar{x}) - \bar{n}_0] = 0 \quad (21)$$

equação de continuidade para lacunas

$$\frac{d^2 \bar{p}(\bar{x})}{d\bar{x}^2} + \frac{d}{d\bar{x}} \left[ \bar{p}(\bar{x}) \frac{d\psi(\bar{x})}{d\bar{x}} \right] - \frac{1}{\bar{\tau}_p} \cdot [\bar{p}(\bar{x}) - \bar{p}_0] = 0 \quad (22)$$

equação de Poisson

$$\frac{d^2 \psi(\bar{x})}{d\bar{x}^2} = \bar{n}(\bar{x}) - \bar{p}(\bar{x}) - \bar{N}_D(\bar{x}) \quad (23)$$

Junção pn Abrupta Simétrica

O modelo matemático descrito pelas equações (16) - (18) simula vários tipos de dispositivos semicondutores, entretanto, por

simplicidade vamos considerar uma junção pn, isto é, regiões do semiconductor em que uma distribuição não uniforme de impurezas dá lugar a uma mudança essencialmente abrupta de um material tipo p para um material tipo n. A fig. 3.1 mostra a estrutura física de uma junção pn.

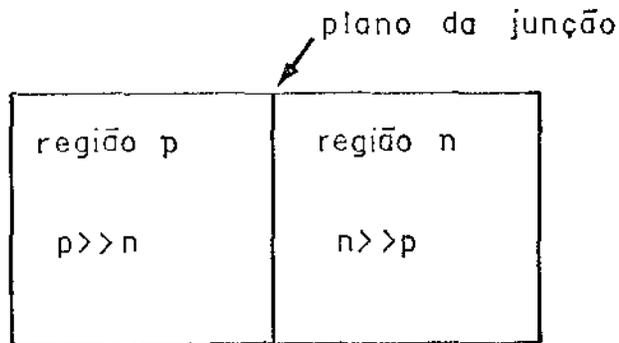


Fig. 3.1 Junção pn

Consideramos uma junção pn idealizada, na qual a variação da concentração de impurezas ocorra abruptamente, como ilustra a Fig. 3.2. Neste gráfico foi representada, em função da distância, a concentração efetiva de impurezas  $N_D(x)$  que é definida por

$$N_D(x) = N_d(x) - N_a(x) \quad .$$

De acordo com a definição acima,  $N_D(x)$  é positiva em um material tipo n e negativa em um material tipo p. Indicaremos as concentrações efetivas de impurezas das regiões homogêneas tipo p e tipo n por  $-N_a$  e  $N_d$ , respectivamente,

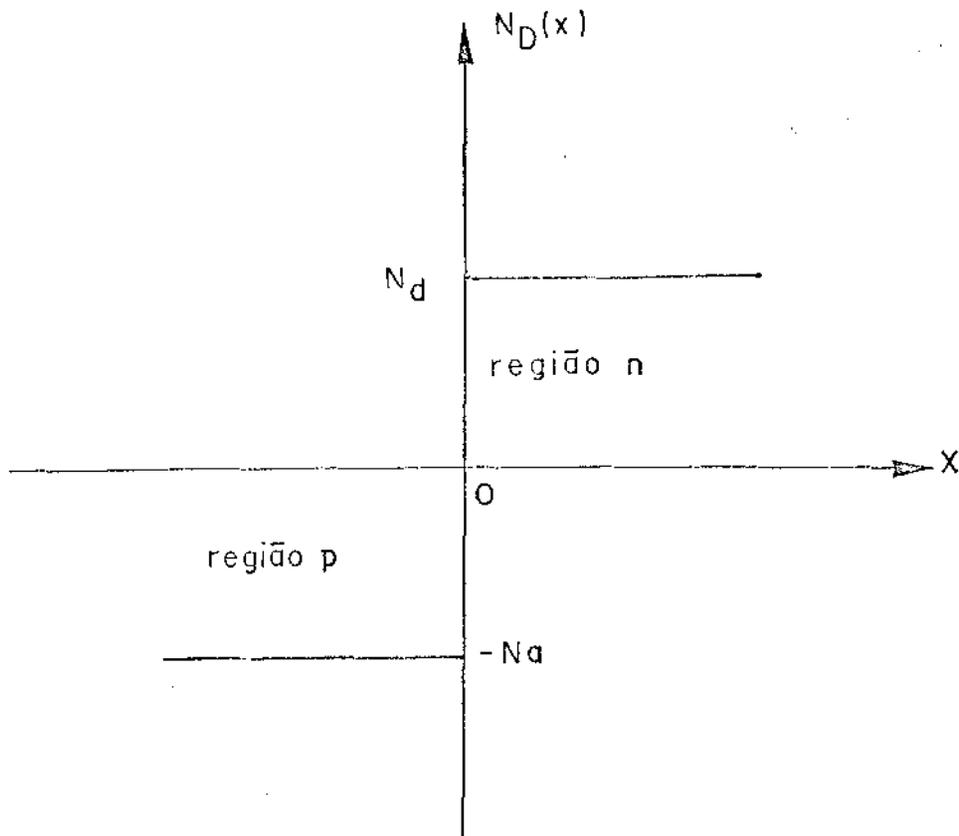


Fig. 3.2 - Distribuição de Impurezas numa Junção pn

onde,  $N_a$  = densidade de impureza aceitadora ionizada

$N_d$  = densidade de impureza doadora ionizada,

portanto, temos que

$$N_D(x) = \begin{cases} N_d & , \quad \text{região n} \\ -N_a & , \quad \text{região p.} \end{cases} \quad (24)$$

Assim as equações (16) - (18) simulam uma junção pn quando a função  $N_D(x)$  é definida por (24). Dizemos que a junção é simétrica quando  $N_a = N_d$ .

## CAPÍTULO IV

### O MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS NA SIMULAÇÃO DE DISPOSITIVOS SEMICONDUTORES

#### 4.0 INTRODUÇÃO

Neste capítulo vamos utilizar o método de Galerkin para encontrar uma solução discreta para o sistema de equações (21)-(23)-Capítulo III. Portanto vamos definir o problema de valor de fronteira para dispositivos semicondutores em um subespaço de dimensão finita  $V_h$  do espaço de Hilbert  $H^1(\Omega)$ , com  $\Omega = [0, a] \subset \mathbb{R}$ . Mais especificamente, para cada subespaço  $V_h$  de  $H^1(\Omega)$ , associamos o problema discreto: encontrar  $n_h, p_h$  e  $\psi_h \in V_h$  que satisfaçam o sistema de equações,

$$\int_{\Omega} \psi_h''(x) v_h(x) dx = \int_{\Omega} (n_h(x) - p_h(x) - N_D) v_h(x) dx \quad (1)$$

$$\int_{\Omega} n_h''(x) v_h(x) dx - \int_{\Omega} [n_h(x) \psi_h'(x)]' v_h(x) dx - \frac{1}{\tau_n} \int_{\Omega} [n_h(x) - n_0] v_h(x) dx = 0 \quad (2)$$

$$\int_{\Omega} p_h''(x) v_h(x) dx + \int_{\Omega} [p_h(x) \psi_h'(x)]' v_h(x) dx - \frac{1}{\tau_p} \int_{\Omega} [p_h(x) - p_0] v_h(x) dx = 0 \quad (3)$$

para toda  $v_h \in V_h$ , isto é, estamos procurando uma solução fraca

discreta para o sistema de equações diferenciais não-lineares que rege os dispositivos semicondutores.

Seja  $\{\phi_j(x)\}_{j=1}^m$  uma base para o espaço  $V_h$ , então as funções  $n_h, p_h$  e  $\psi_h \in V_h$  são escritas na forma

$$n_h(x) = \sum_{j=1}^m n_j \phi_j(x) \quad (4)$$

$$p_h(x) = \sum_{j=1}^m p_j \phi_j(x) \quad (5)$$

$$\psi_h(x) = \sum_{j=1}^m \psi_j \phi_j(x) \quad (6)$$

para  $\phi_j(x_i) = \delta_{ij}$ , onde  $\pi : 0 = x_1 < \dots < x_m = a$  é uma partição regular do intervalo  $[0, a]$ , isto é,  $x_{i+1} - x_i = h$ .

O Método de Galerkin exige que o resíduo para a solução discreta seja ortogonal ao subespaço  $V_h = \text{span} \{\phi_j(x)\}_{j=1}^m$ , o que é equivalente ao sistema de equações (1) - (3). Neste caso, o método de Galerkin nos fornece um sistema não-linear com  $3m$  equações nas variáveis  $n_1, \dots, n_m, p_1, \dots, p_m, \psi_1, \dots, \psi_m$ , que vamos resolver pelo método de Newton.

## 4.1 AS EQUAÇÕES DO MÉTODO DE GALERKIN

Como o sistema (1) - (3) é válido para toda função  $v_h \in V_h$ , em particular, é válido para toda função  $\phi_i(x)$  pertencente à base de  $V_h$ . Assim o sistema (1) - (3) pode ser reescrito da seguinte forma:

$$\int_{\Omega} \psi_h''(x) \phi_i(x) dx = \int_{\Omega} [n_h(x) - p_h(x) - N_D] \phi_i(x) dx \quad ,$$

integrando por partes o lado esquerdo, temos que

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \psi_h''(x) \phi_i(x) dx &= \psi_h'(x) \phi_i(x) \Big|_0^a - \int_{\Omega} \psi_h'(x) \phi_i'(x) dx \\ &= - \int_{\Omega} \psi_h'(x) \phi_i'(x) dx \end{aligned}$$

para  $i=2, \dots, (m-1)$ , pois  $\phi_i(0) = \phi_i(a) = 0$ , assim obtemos a seguinte equação

$$\int_{\Omega} \psi_h'(x) \phi_i'(x) dx + \int_{\Omega} [n_h(x) - p_h(x)] \phi_i(x) dx - N_D \int_{\Omega} \phi_i(x) dx = 0, \quad (7)$$

usando o mesmo procedimento para a equação(2), obtemos

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} n_h''(x) \phi_i(x) dx - \int_{\Omega} [n_h(x) \psi_h'(x)]' \phi_i(x) dx - \frac{1}{\tau_n} \int_{\Omega} [n_h(x) - n_0] \phi_i(x) dx = \\ = 0 \end{aligned}$$

fazendo integração por partes, vem que

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} n_h''(x) \phi_i(x) dx &= n_h'(x) \phi_i(x) \Big|_0^a - \int_{\Omega} n_h'(x) \phi_i'(x) dx \\ &= - \int_{\Omega} n_h'(x) \phi_i'(x) dx \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} [n_h(x) \psi_h'(x)]' \phi_i(x) dx &= n_h(x) \psi_h'(x) \phi_i(x) \Big|_0^a - \int_{\Omega} n_h(x) \psi_h'(x) \phi_i'(x) dx \\ &= - \int_{\Omega} n_h(x) \psi_h'(x) \phi_i'(x) dx \end{aligned}$$

para  $i = 2, \dots, (m-1)$ , pois  $\phi_i(0) = \phi_i(a) = 0$ , assim obtemos a seguinte equação

$$\int_{\Omega} n_h(x) \psi_h'(x) \phi_i'(x) dx - \int_{\Omega} n_h'(x) \phi_i'(x) dx - \frac{1}{\tau_n} \int_{\Omega} [n_h(x) - n_0] \phi_i(x) dx = 0, (8)$$

usando o mesmo procedimento para a equação (3), obtemos

$$\int_{\Omega} p_h''(x) \phi_i(x) dx + \int_{\Omega} [p_h(x) \psi_h'(x)]' \phi_i(x) dx - \frac{1}{\tau_p} \int_{\Omega} [p_h(x) - p_0] \phi_i(x) dx = 0$$

fazendo integração por partes e usando o argumento anterior, temos que

$$\int_{\Omega} p_h''(x) \phi_i(x) dx = -\int_{\Omega} p_h'(x) \phi_i'(x) dx$$

$$\int_{\Omega} [p_h(x) \psi_h'(x)]' \phi_i(x) dx = -\int_{\Omega} p_h(x) \psi_h'(x) \phi_i'(x) dx$$

para  $i = 2, \dots, (m-1)$ , assim obtemos a seguinte equação

$$\int_{\Omega} p_h(x) \psi_h'(x) \phi_i'(x) dx + \int_{\Omega} p_h'(x) \phi_i'(x) dx + \frac{1}{\tau_p} \int_{\Omega} [p_h(x) - p_0] \phi_i(x) dx = 0 \quad (9)$$

As equações do método de Galerkin são obtidas pela substituição das funções  $n_h(x)$ ,  $p_h(x)$  e  $\psi_h(x)$  escritas na forma (4) - (6) nas equações (7) - (9).

Equação de Poisson: substituindo (4) - (6) em (7) obtemos o seguinte sistema linear

$$\sum_{j=1}^m \psi_j \int_{\Omega} \phi_i'(x) \phi_j'(x) dx + \sum_{j=1}^m (n_j - p_j) \int_{\Omega} \phi_i(x) \phi_j(x) dx -$$

$$- N_D \int_{\Omega} \phi_i(x) dx = 0$$

para  $i = 1, \dots, m$ . Vamos definir as seguintes matrizes

$$K_{ij} = \int_{\Omega} \phi_i'(x) \phi_j'(x) dx \quad (10)$$

$$M_{ij} = \int_{\Omega} \phi_i(x) \phi_j(x) dx \quad (11)$$

para  $i, j = 1, \dots, m$  e o vetor

$$F_i = \int_{\Omega} \phi_i(x) dx \quad (12)$$

para  $i = 1, \dots, m$ . Assim, o sistema linear pode ser reescrito da seguinte forma:

$$\sum_{j=1}^m K_{ij} \psi_j + \sum_{j=1}^m M_{ij} (n_j - p_j) - N_D F_i = 0 \quad (13)$$

para  $i = 1, \dots, m$ .

Equação de Continuidade para Elétrons: substituindo (4)-(6) em (8), obtemos o sistema não-linear

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^m \sum_{k=1}^m n_j \psi_k \int_{\Omega} \phi_i'(x) \phi_j(x) \phi_k'(x) dx - \sum_{j=1}^m n_j \int_{\Omega} \phi_i'(x) \phi_j'(x) dx - \\ - \frac{1}{\tau_n} \sum_{j=1}^m n_j \int_{\Omega} \phi_i(x) \phi_j(x) dx + \frac{n_0}{\tau_n} \int_{\Omega} \phi_i(x) dx = 0 \end{aligned}$$

para  $i = 1, \dots, m$ . Vamos definir a matriz

$$H_{ijk} = \int_{\Omega} \phi_i'(x) \phi_j(x) \phi_k'(x) dx \quad (14)$$

para  $i, j, k = 1, \dots, m$ . Assim o sistema não-linear pode ser reescrito da seguinte forma:

$$\sum_{j=1}^m \sum_{k=1}^m H_{ijk} n_j \psi_k - \sum_{j=1}^m (K_{ij} + M_{ij}/\tau_n) n_j + (n_0/\tau_n) F_i = 0 \quad (15)$$

para  $i = 1, \dots, m$ .

Equação de Continuidade para Lacunas: substituindo (4) - (6) em (9), obtemos o sistema não-linear

$$\begin{aligned} & \sum_{j=1}^m \sum_{k=1}^m p_j \psi_k \int_{\Omega} \phi_i'(x) \phi_j(x) \phi_k'(x) dx + \sum_{j=1}^m p_j \int_{\Omega} \phi_i'(x) \phi_j'(x) dx + \\ & + \frac{1}{\tau_p} \sum_{j=1}^m p_j \int_{\Omega} \phi_i(x) \phi_j(x) dx - p_0/\tau_p \int_{\Omega} \phi_i(x) dx = 0 \end{aligned}$$

para  $i = 1, \dots, m$ . Fazendo uso das fórmulas (10), (11), (12) e (14) o sistema não-linear pode ser reescrito da seguinte forma

$$\sum_{j=1}^m \sum_{k=1}^m H_{ijk} p_j \psi_k + \sum_{j=1}^m (K_{ij} + M_{ij}/\tau_p) p_j - (p_0/\tau_p) F_i = 0 \quad (16)$$

para  $i = 1, \dots, m$ .

Agrupando os sistemas (13), (15) e (16) obtemos um sistema não-linear com  $3m$  equações nas variáveis  $n_1, \dots, n_m, p_1, \dots, p_m, \psi_1, \dots, \psi_m$ , que vamos reescrever da seguinte forma:

(17)

$$G_i^1(\vec{n}, \vec{p}, \vec{\psi}) =$$

$$= \sum_{j=1}^m K_{ij} \psi_j + \sum_{j=1}^m M_{ij} (n_j - p_j) - N_D F_i = 0$$

$$G_i^2(\vec{n}, \vec{p}, \vec{\psi}) =$$

$$= \sum_{j=1}^m \sum_{k=1}^m H_{ijk} n_j \psi_k - \sum_{j=1}^m (K_{ij} + M_{ij}/\tau_n) n_j + (n_o/\tau_n) F_i = 0$$

$$G_i^3(\vec{n}, \vec{p}, \vec{\psi}) =$$

$$= \sum_{j=1}^m \sum_{k=1}^m H_{ijk} p_j \psi_k + \sum_{j=1}^m (K_{ij} + M_{ij}/\tau_p) p_j - (p_o/\tau_p) F_i = 0$$

para  $i = 1, \dots, m$ , onde estamos usando a notação

$$\vec{n} = (n_1, \dots, n_m) \in \mathbb{R}^m$$

$$\vec{p} = (p_1, \dots, p_m) \in \mathbb{R}^m$$

$$\vec{\psi} = (\psi_1, \dots, \psi_m) \in \mathbb{R}^m$$

e vamos denotar o sistema (17) na forma compacta

$$G(\vec{n}, \vec{p}, \vec{\psi}) = \begin{bmatrix} G^1(\vec{n}, \vec{p}, \vec{\psi}) \\ G^2(\vec{n}, \vec{p}, \vec{\psi}) \\ G^3(\vec{n}, \vec{p}, \vec{\psi}) \end{bmatrix} = 0 \quad . \quad (18)$$

Portanto o problema de encontrar uma solução discreta para o sistema de equações diferenciais não lineares, que rege a condução elétrica nos dispositivos semicondutores, pelo método de Galerkin, fica reduzido à resolução do sistema não-linear (17) com  $3m$  equações, que vamos resolver pelo método de Newton.

#### 4.2 O MÉTODO DE NEWTON

Vamos resolver o sistema não-linear (17) pelo método de Newton,

$$G'(\vec{\alpha}^n) \cdot \Delta \vec{\alpha} = -G(\vec{\alpha}^n) \quad , \quad (19)$$

onde  $G'(\vec{\alpha})$  é o Jacobiano do sistema e

$$\Delta \vec{\alpha} = \vec{\alpha}^{n+1} - \vec{\alpha}^n \quad ,$$

com  $\vec{\alpha} = (n_1, \dots, n_m, p_1, \dots, p_m, \psi_1, \dots, \psi_m) \in \mathbb{R}^{3m}$  .

O Jacobiano  $G'(\vec{\alpha})$  é escrito na forma:

$$G' = \begin{bmatrix} \frac{\partial G^1}{\partial \vec{n}} & \frac{\partial G^1}{\partial \vec{p}} & \frac{\partial G^1}{\partial \vec{\psi}} \\ \frac{\partial G^2}{\partial \vec{n}} & \frac{\partial G^2}{\partial \vec{p}} & \frac{\partial G^2}{\partial \vec{\psi}} \\ \frac{\partial G^3}{\partial \vec{n}} & \frac{\partial G^3}{\partial \vec{p}} & \frac{\partial G^3}{\partial \vec{\psi}} \end{bmatrix}$$

onde

$$\frac{\partial G^1}{\partial \vec{n}} = \frac{\partial (G_1^1, \dots, G_m^1)}{\partial (n_1, \dots, n_m)} = \frac{\partial G_i^1}{\partial n_j}$$

$$= M_{ij}$$

(20)

$$\frac{\partial G^1}{\partial \vec{p}} = \frac{\partial (G_1^1, \dots, G_m^1)}{\partial (p_1, \dots, p_m)} = \frac{\partial G_i^1}{\partial p_j}$$

$$= -M_{ij}$$

(21)

$$\frac{\partial G^1}{\partial \vec{\psi}} = \frac{\partial (G_1^1, \dots, G_m^1)}{\partial (\psi_1, \dots, \psi_m)} = \frac{\partial G_i^1}{\partial \psi_j}$$

$$= K_{ij}$$

(22)

$$\begin{aligned} \frac{\partial G^2}{\partial \vec{n}} &= \frac{\partial (G_1^2, \dots, G_m^2)}{\partial (n_1, \dots, n_m)} = \frac{\partial G_i^2}{\partial n_j} \\ &= \sum_{k=1}^m H_{ijk} \psi_k - (K_{ij} + M_{ij}/\tau_n) \end{aligned} \quad (23)$$

$$\frac{\partial G^2}{\partial \vec{p}} = \frac{\partial (G_1^2, \dots, G_m^2)}{\partial (p_1, \dots, p_m)} = \frac{\partial G_i^2}{\partial p_j} = 0 \quad (24)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial G^2}{\partial \vec{\psi}} &= \frac{\partial (G_1^2, \dots, G_m^2)}{\partial (\psi_1, \dots, \psi_m)} = \frac{\partial G_i^2}{\partial \psi_j} \\ &= \sum_{k=1}^m H_{ikj} n_k \end{aligned} \quad (25)$$

para  $i, j = 1, \dots, m$  ;

$$\frac{\partial G^3}{\partial \vec{n}} = \frac{\partial (G_1^3, \dots, G_m^3)}{\partial (n_1, \dots, n_m)} = \frac{\partial G_i^3}{\partial n_j} = 0 \quad (26)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial G^3}{\partial \vec{p}} &= \frac{\partial (G_1^3, \dots, G_m^3)}{\partial (p_1, \dots, p_m)} = \frac{\partial G_i^3}{\partial p_j} \\ &= \sum_{k=1}^m H_{ijk} \psi_k + (K_{ij} + M/\tau_p) \end{aligned} \quad (27)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial G^3}{\partial \vec{\psi}} &= \frac{\partial (G_1^3, \dots, G_m^3)}{\partial (\psi_1, \dots, \psi_m)} = \frac{\partial G_i^3}{\partial \psi_j} \\ &= \sum_{k=1}^m H_{ikj} P_k \end{aligned} \quad (28)$$

para  $i, j = 1, \dots, m$ .

#### 4.3 UMA BASE PARA O MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS

A precisão da solução discreta depende em parte da escolha da base para o espaço de aproximação  $V_h$ . Neste trabalho escolhemos  $V_h$  como sendo o espaço vetorial de dimensão finita constituído das funções polinomiais por partes de Hermite cúbicas, isto é,

$$V_h = \text{span} \{ \phi_{01}(x), \dots, \phi_{0m}(x), \phi_{11}(x), \dots, \phi_{1m}(x) \},$$

e por simplicidade vamos usar a seguinte enumeração das funções da base:

$$\phi_{0i}(x) = \phi_{2i-1}(x)$$

$$\phi_{1i}(x) = \phi_{2i}(x)$$

para  $i = 1, \dots, m$ . Portanto as funções  $n_h$ ,  $p_h$  e  $\psi_h \in V_h$  são

escritas na forma

$$n_h(x) = \sum_{j=1}^{2m} n_j \phi_j(x) \quad (29)$$

$$p_h(x) = \sum_{j=1}^{2m} p_j \phi_j(x) \quad (30)$$

$$\psi_h(x) = \sum_{j=1}^{2m} \psi_j \phi_j(x) \quad (31)$$

Sabemos que as funções da base possuem as seguintes propriedades, como ilustra a Fig. 4.1,

$$\left\{ \begin{array}{l} \phi_{2i-1}(x_j) = \delta_{ij} \\ \phi'_{2i-1}(x_j) = 0 \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \phi_{2i}(x_j) = 0 \\ \phi'_{2i}(x_j) = \delta_{ij} \end{array} \right.$$

para  $i, j = 1, \dots, m$ , portanto, temos que

$$\begin{aligned} n_{2i-1} &= n_h(x_i) \\ n_{2i} &= n'_h(x_i) \end{aligned} \quad (32)$$

para  $i = 1, \dots, m$ , analogamente para as funções  $p_h(x)$  e  $\psi_h(x)$ .

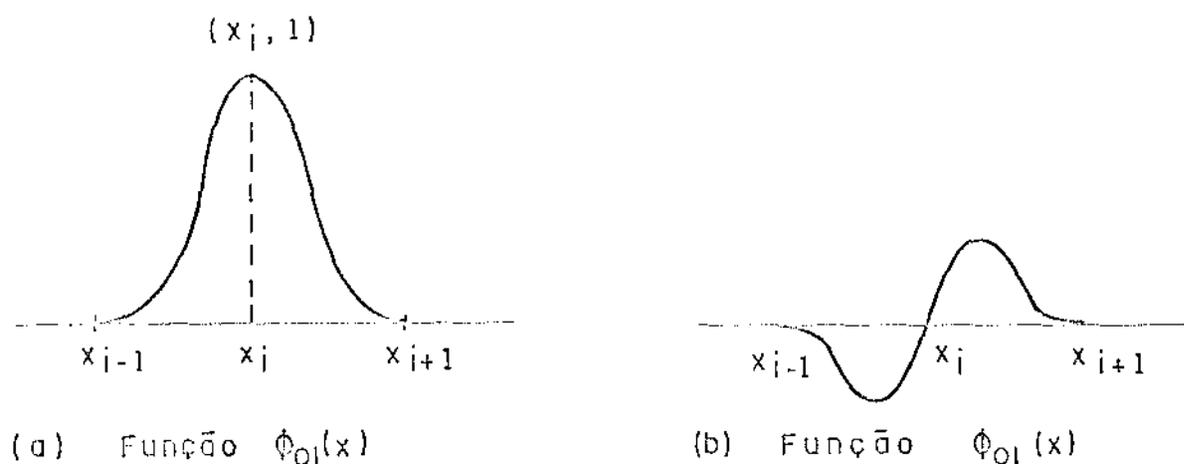


Fig. 4.1 - Funções de Hermite Cúbicas

Podemos concluir da relação (32) que para cada solução discreta temos duas incógnitas em cada nó correspondente às funções  $\phi_{0i}(x)$  e  $\phi_{1i}(x)$ . Assim quando utilizamos as funções de Hermite cúbicas como base para o espaço de aproximação, o sistema não-linear (17) possui  $6m$  equações com  $6m$  variáveis, onde  $m$  é o número de nós da nossa malha.

## CAPÍTULO V

### PROBLEMAS RESOLVIDOS

#### 5.1 CONDIÇÕES DE EQUILÍBRIO NUMA JUNÇÃO pn

Consideramos uma junção pn idealizada, na qual a variação da concentração de impurezas ocorra abruptamente, como mostra a Fig. 3.2.

3.2. Tomamos a junção pn no seguinte referencial

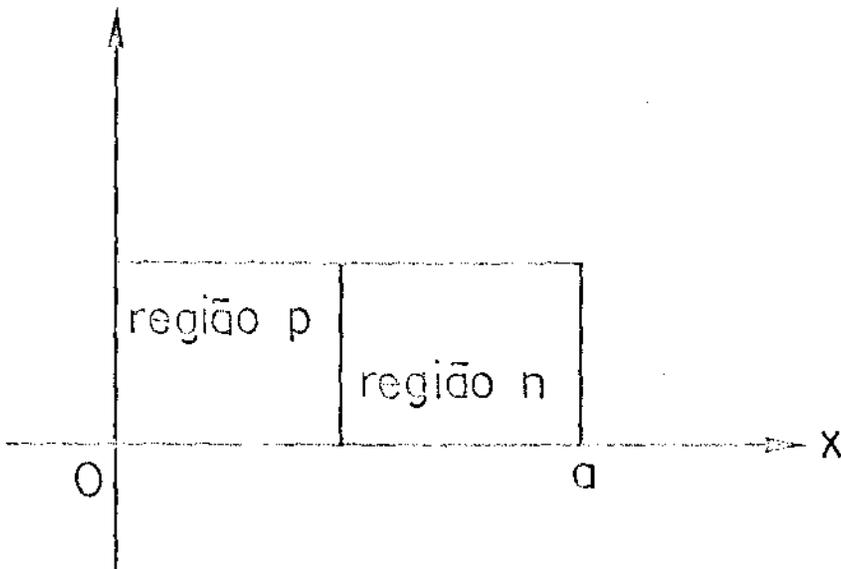


Fig. 5-1 - Junção pn

Nos problemas resolvidos consideramos junções pn abrupta simétrica de germânio (ou silício) com as seguintes características:

PARÂMETROS	GERMÂNIO	SILÍCIO
a	$2 \times 10^{-4}$ cm	$2 \times 10^{-4}$ cm
$n_i$	$2.5 \times 10^{13}$ cm <sup>-3</sup>	$1.5 \times 10^{10}$ cm <sup>-3</sup>
$\mu_n$	$3.9 \times 10^3$ cm <sup>2</sup> /V.sec	$13.5 \times 10^2$ cm <sup>2</sup> /V.sec
$\mu_p$	$1.9 \times 10^3$ cm <sup>2</sup> /V.sec	$4.7 \times 10^2$ cm <sup>2</sup> /V.sec
$D_n$	$1 \times 10^2$ cm <sup>2</sup> /sec	$3.5 \times 10$ cm <sup>2</sup> /sec
$D_p$	$5 \times 10$ cm <sup>2</sup> /sec	$1.2 \times 10$ cm <sup>2</sup> /sec
$L_D$	$8 \times 10^{-5}$ cm	$3 \times 10^{-3}$ cm
$\tau_n$	$1 \times 10^{-5}$ sec	$1 \times 10^{-5}$ sec
$\tau_p$	$1 \times 10^{-5}$ sec	$1 \times 10^{-5}$ sec

As condições de contorno foram consideradas do seguinte modo:  
a condição de contorno para as densidades de elétrons e lacunas é imposta de modo que não existam portadores de carga em excesso nos contatos, isto é,

$$n(0) \cdot p(0) = n_i^2 \quad (1)$$

$$n(a) \cdot p(a) = n_i^2 \quad , \quad (2)$$

então no contato  $x = 0$  que é uma região tipo p em que  $N_d = 0$  e  $N_a \gg n_i$ , da relação (1) temos as seguintes condições de contorno

$$n(0) = n_i^2 / N_a \quad (3)$$

$$p(0) = N_a \quad , \quad (4)$$

e para o contato  $x = a$  que é uma região tipo n em que  $N_a = 0$  e  $N_d \gg n_i$ , da relação (2) temos as seguintes condições de contorno

$$n(a) = N_d \quad (5)$$

$$p(a) = n_i^2 / N_d \quad . \quad (6)$$

Em condições de equilíbrio, isto é, não tendo tensão aplicada à junção, sabemos que as densidades de corrente para elétrons e lacunas devem anular-se separadamente, desse fato podemos obter relações entre as densidades de portadores de carga em equilíbrio e o potencial eletrostático, essas relações são dadas por (ver ref. [3])

$$\psi(x) = \frac{KT}{q} \ln(n(x) / n_i) \quad (7)$$

$$\psi(x) = - \frac{kT}{q} \ln (p(x) / n_i) \quad . \quad (8)$$

Desse modo, a condição de contorno para o potencial eletrostático pode ser escrita da seguinte forma:

$$\psi(o) = \frac{kT}{q} \ln (n(o) / n_i) \quad (9)$$

$$\psi(a) = \frac{kT}{q} \ln (n(a) / n_i) \quad , \quad (10)$$

onde  $n(o)$  e  $n(a)$  são dadas pelas eqs. (3) e (5).

Para situação de equilíbrio obtivemos as densidades de elétrons e lacunas com um comportamento qualitativo ilustrado pela Fig. 5.2 e o comportamento qualitativo do potencial eletrostático ilustrado pela Fig. 5.3.

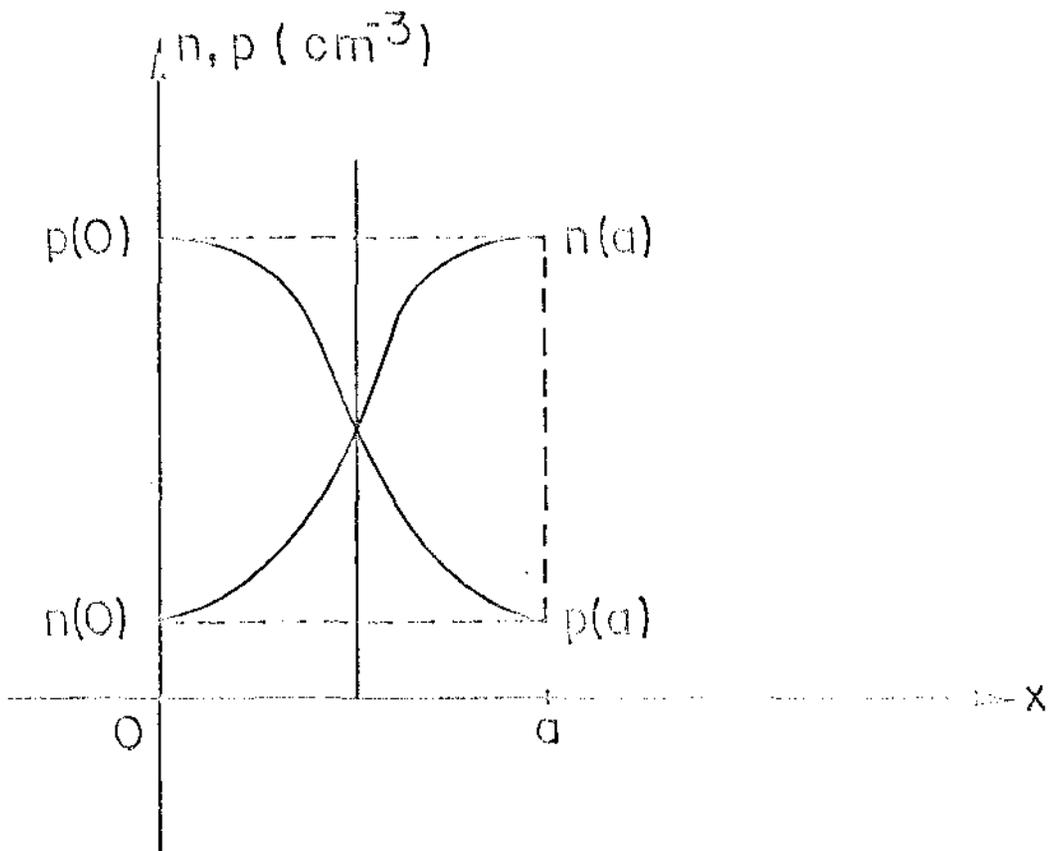


Fig- 5.2 - Concentração de Portadores em Equilíbrio

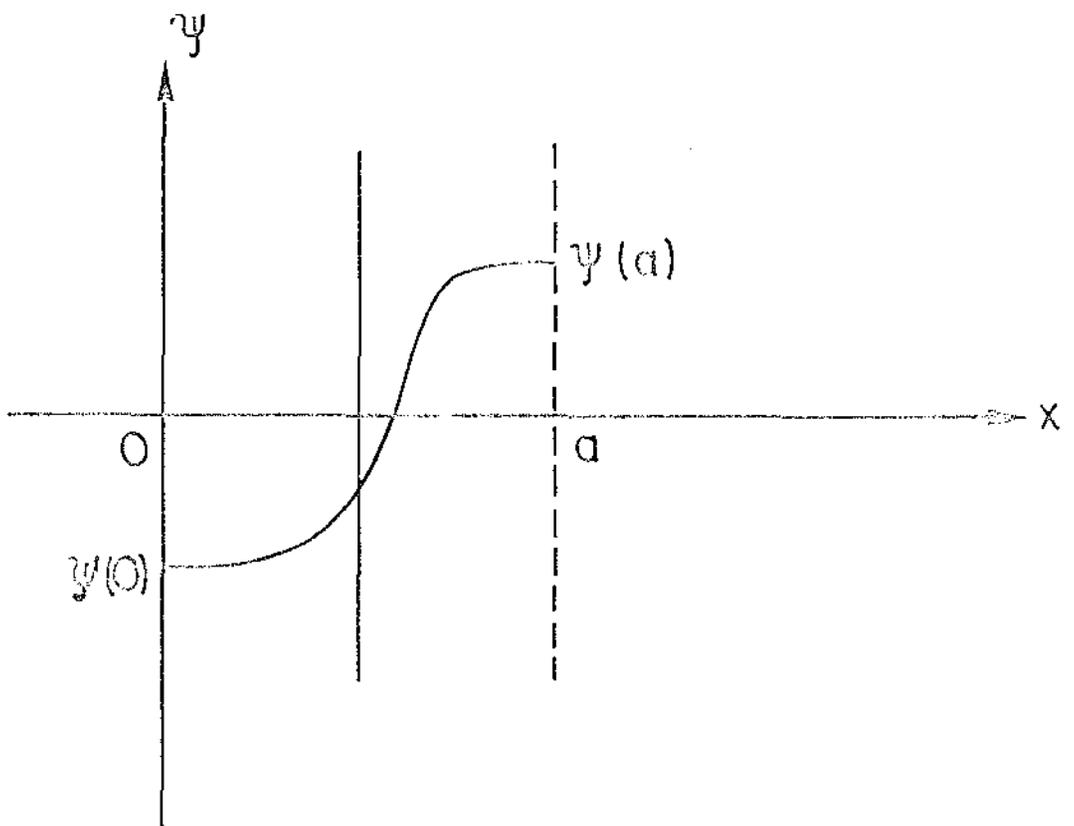


Fig. 5.3 - Potencial Eletrostático

## 5.2 CONDIÇÕES DE Desequilíbrio NUMA JUNÇÃO pn

Um outro problema de interesse, é o estudo do comportamento físico interno de uma junção pn, quando a situação de equilíbrio é perturbada. Vamos considerar especificamente o caso de uma variação da altura da barreira de potencial, isto é,  $\psi(a) - \psi(o)$ . Tal variação pode ser causada pela aplicação de uma tensão nos contatos fixados nos extremos das regiões tipo p e tipo n.

Uma tensão que torna o terminal da região tipo p mais positivo em relação ao terminal da região tipo n, reduz a barreira de potencial, é denominada tensão direta e dizemos que a junção está diretamente polarizada. Por outro lado, uma tensão com polarização oposta aumenta a barreira de potencial e dizemos que a junção está inversamente polarizada.

Esta condição de desequilíbrio na junção pn pode ser descrita pelas seguintes condições de contorno:

as condições de contorno para as densidades de elétrons e lacunas ficam as mesmas dadas pelas equações (3) - (6). A condição de contorno para o potencial eletrostático é dado da seguinte forma:

$$\psi(o) = \frac{KT}{q} \ln (n(o) / n_i) \quad (11)$$

$$\psi(a) = -V_j + \frac{KT}{q} \ln (n(a) / n_i) \quad , \quad (12)$$

onde  $V_j$  é a tensão aplicada à junção. Temos que, para  $V_j$  positivo corresponde uma polarização direta da junção pn e para  $V_j$  negativo corresponde a uma polarização inversa da junção pn.

Para a situação de desequilíbrio foram feitos vários testes tomando para valores da tensão aplicada à junção  $V_j = 25$  mV, 50 mV, 75 mV e variando as densidades de impurezas aceitadora ( $N_a$ ) e doadora ( $N_d$ ). Em todos os problemas consideramos uma junção pn abrupta simétrica, isto é,  $N_d = N_a$ . Os resultados obtidos foram satisfatórios, pelo menos, de um ponto de vista qualitativo.

### 5.3 CONCLUSÕES E SUGESTÕES

Podemos dizer que a aplicação do método de elementos finitos ao problema de valor inicial e de fronteira para dispositivos semicondutores é um procedimento útil, o qual nos leva sempre a resultados satisfatórios. Nos problemas resolvidos tivemos uma convergência quadrática do método de Newton para valores de  $N_a = N_d$  próximos da concentração intrínseca e uma convergência linear quando  $N_a = N_d = 10^4 \times n_i$  e tendo uma não convergência para  $N_a = N_d$  muito maior que a concentração intrínseca.

Para trabalhos futuros, na simulação de junções pn abrupta simétrica, podemos dar as seguintes sugestões: do ponto de vista físico podemos considerar que:

i. as densidades de elétrons e lacunas variam tanto na direção

- x como na direção y, isto é, caso bidimensional;
- ii. os coeficientes de difusão e mobilidade sejam funções das densidades de impurezas ionizadas no material semiconductor intrínseco;
- iii. o termo de recombinação seja expresso por

$$R(n,p) = \frac{n(x) p(x) - n_i^2}{\tau (n(x) + p(x) + 2n_i)}$$

Podemos também simular uma célula solar, bastando para isso considerar o termo  $G(x)$ , que representa a taxa de geração de pares elétrons-lacunas devido uma radiação de uma fonte externa, nas equações de continuidade para elétrons e lacunas.

Do ponto de vista do método de elementos finitos podemos considerar o espaço de dimensão finita  $V_h$  gerado por funções "splines" cúbicas, funções quadráticas ou funções lineares.

Do ponto de vista matemático, a análise da existência e unicidade da solução para o sistema de equações diferenciais parciais não-lineares, que rege a condução elétrica nos dispositivos semicondutores, bem como a dependência contínua dos dados iniciais, está feita no trabalho de Mock, M.S. [5], para o problema não-estacionário. Para o problema estacionário a análise de existência e unicidade está feita publicação de Mock, M.S. [6], onde o

autor despreza o termo de geração e o termo de recombinação de pares elétrons - lacunas, fato que deixa o modelo fora da realidade dos dispositivos semicondutores.

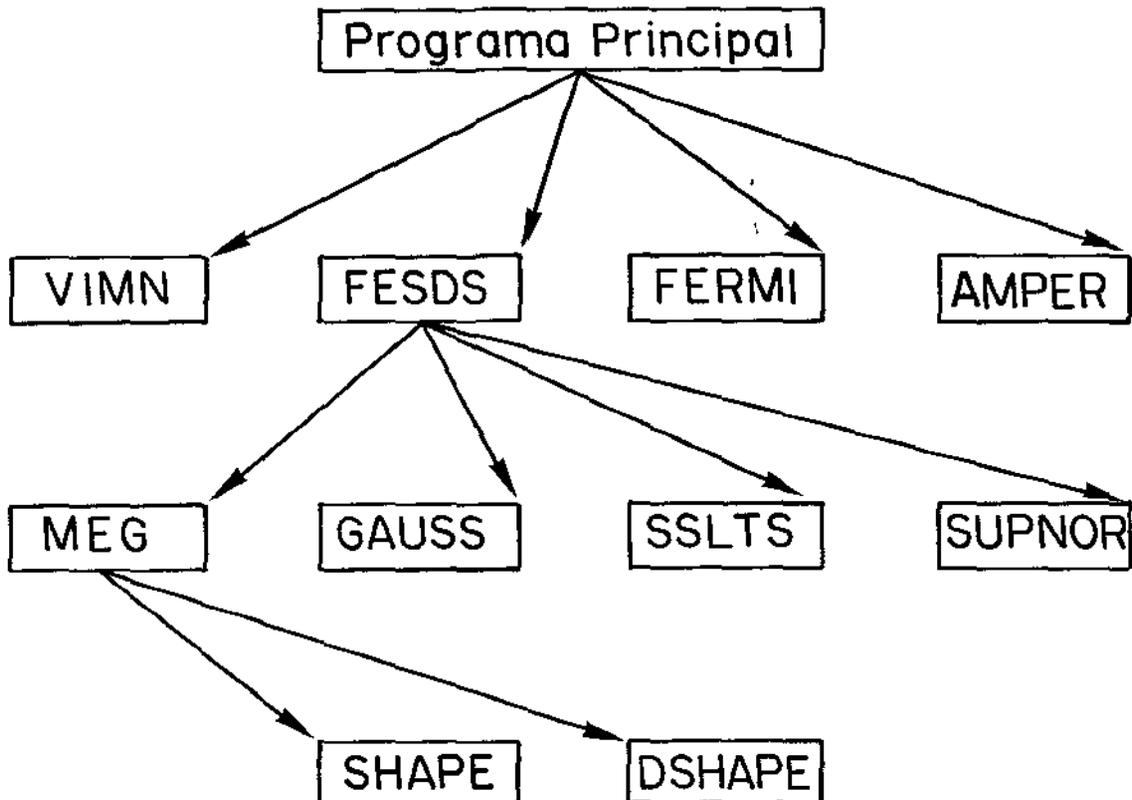
A análise da existência e unicidade, bem como o estudo da dependência contínua dos dados iniciais, para o problema estacionário no qual consideramos os termos de geração e recombinação, pode dar origem a um novo trabalho de tese, tendo em vista que não existem publicações neste sentido.

APÊNDICE I

## APÊNDICE I

### IMPLEMENTAÇÃO COMPUTACIONAL DO MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS NA SIMULAÇÃO DE UMA JUNÇÃO pn ABRUPTA

Fizemos a implementação computacional do Método de Elementos Finitos, através do método frontal, para simular uma junção pn, na qual o espaço de aproximação foi gerado pelas funções de Hermite cúbicas. O programa foi implementado em FORTRAN IV, e possui a seguinte estrutura,



A seguir vamos descrever o programa principal e cada uma das subrotinas, em ordem de chamada.

## PROGRAMA PRINCIPAL

### Descrição dos Parâmetros de Entrada

- DDSC : variável real, precisão dupla, indicando a dimensão do dispositivo semicondutor, em centímetros.
- DRP : variável real, precisão dupla, indicando a dimensão da região tipo p, em centímetros.
- N : variável inteira, indicando o número de nós.
- DES : variável real, precisão dupla, indicando a densidade de elétrons no contato da região tipo p, em nº de portadores por centímetro cúbico.
- DED : variável real, precisão dupla, indicando a densidade de elétrons no contato da região tipo n, em nº de portadores por centímetro cúbico.
- DLS : variável real, precisão dupla, indicando a densidade de lacunas no contato da região tipo p, em nº de portadores por centímetro cúbico.

- DL D : variável real, precisão dupla, indicando a densidade de lacunas no contato da região tipo n, em nº de portadores por centímetro cúbico.
- TAJ : variável real, precisão dupla, indicando a tensão aplicada à junção, em volts.
- ACEPTE : variável real, precisão dupla, indicando a densidade de impureza aceitadora ionizada, em nº de cargas negativas imóveis por centímetro cúbico.
- DONOR : variável real, precisão dupla, indicando a densidade de impureza doadora ionizada, em nº de cargas positivas imóveis por centímetro cúbico.
- IM : variável inteira, indicando o código do material semicondutor intrínseco - Germânio (IM = 1), Silício (IM=2).
- IC : variável inteira, indicando o código da aproximação inicial para o método de Newton - solução anterior (IC = 0), uma reta (IC = 1).

## Descrição das Variáveis Utilizadas

- X : vetor real, precisão dupla, de dimensão pelo menos igual a N. É um vetor de trabalho, que contém as coordenadas dos nós.
- ELET : vetor real, precisão dupla, de dimensão pelo menos igual a 2N. É um vetor de saída, que contém a densidade de elétrons em cada nó (ELET (2I-1)) e a sua derivada (ELET (2I)).
- HOLE : vetor real, precisão dupla, de dimensão pelo menos igual a 2N. É um vetor de saída, que contém a densidade de lacunas em cada nó (HOLE (2I-1)) e a sua derivada (HOLE (2I)).
- VOLT : vetor real, precisão dupla, de dimensão pelo menos igual a 2N. É um vetor de saída, que contém o potencial eletrostático em cada nó (VOLT (2I-1)) e a sua derivada (VOLT (2I)).
- FERN : vetor real, precisão dupla, de dimensão pelo menos igual a N. É um vetor de saída, que contém o nível quase-Fermi para elétrons em cada nó.

- FERP : vetor real, precisão dupla, de dimensão pelo menos igual a N. É um vetor de saída, que contém o nível quase-Fermi para lacunas em cada nó.
- CURR : vetor real, precisão dupla, de dimensão pelo menos igual a N. É um vetor de saída, que contém a densidade total de corrente.
- CPCSI : vetor real, precisão dupla, de dimensão igual a 2. É um vetor de trabalho, que contém a densidade dos portadores de carga no semicondutor intrínseco - Germânio (CPCSI (1)), Silício (CPCSI (2)).
- DEBYE : vetor real, precisão dupla, de dimensão igual a 2. É um vetor de trabalho, que contém o comprimento de Debye - Germânio (DEBYE (1)), Silício (DEBYE (2)).
- TENTER : variável real, precisão dupla. É uma variável de trabalho, indicando a tensão térmica, em volts.
- VS : variável real, precisão dupla, indicando o potencial eletrostático no contato da região tipo p, em volts.
- VD : variável real, precisão dupla, indicando o potencial eletrostático no contato da região tipo n, em volts.

## SUBROUTINE VIMN

Calcula a aproximação inicial para as densidades de elétrons e lacunas e para o potencial eletrostático, que serão utilizados para iniciar o método de Newton. Como aproximação inicial será considerada uma reta que liga as condições de contorno.

## Descrição dos Parâmetros

X, ELET, HOLE, VOLT, DES, DED, DLS, DLD, VD, VS, N: estão descritos no programa principal.

## SUBROUTINE FESDS

Calcula a solução fraca discreta para o sistema de equações diferenciais não-lineares, que rege a condução elétrica em uma junção pn abrupta simétrica, através do método frontal. Utilizando o método de Newton para resolver o sistema não - linear com  $6N$  equações com  $6N$  incógnitas, fornecido pelo método de elementos finitos, onde  $N$  é o número de nós.

## Descrição dos Parâmetros

X, ELET, HOLE, VOLT, ACEPTE, DONOR, DRP, IM, N: estão descritos no programa principal.

### Descrição das Variáveis Utilizadas

- DELTA : vetor real, precisão dupla, de dimensão pelo menos igual a  $6N$ . É um vetor de trabalho, que contém a solução do sistema linear fornecido pelo método de Newton - equação (19) cap. IV.
- M : matriz real, precisão dupla, de dimensão igual a  $4 \times 4$ . É uma matriz elementar, onde seus elementos são definidos a partir da equação (11) cap. IV.
- K : matriz real, precisão dupla, de dimensão igual a  $4 \times 4$ . É uma matriz elementar, onde seus elementos são definidos a partir da equação (10) cap. IV.
- H : matriz real, precisão dupla, de dimensão igual a  $4 \times 4 \times 4$ . É uma matriz elementar, onde seus elementos são definidos a partir da equação (14) cap. IV.
- F : vetor real, precisão dupla, de dimensão igual a 4. É um vetor elementar, onde seus elementos são definidos a partir da equação (12) cap. IV.
- A : matriz real, precisão dupla, de dimensão igual a  $12 \times 12$ . É uma matriz de trabalho, que contém o Jacobiano do sistema não-linear (17) cap. IV, definido em cada elemento finito.

- B : vetor real, precisão dupla, de dimensão igual a 12. É um vetor de trabalho, que contém o sistema não - linear (17) cap. IV, definido em cada elemento finito.
- SYST : vetor real, precisão dupla, de dimensão igual a 4. É um vetor de trabalho, utilizado para construir o vetor B.
- Jacob : matriz real, precisão dupla, de dimensão igual a  $4 \times 4$  . É uma matriz de trabalho, utilizada para construir a matriz A.
- BB : vetor real, precisão dupla, de dimensão igual a 6. É um vetor de trabalho, definido por:  $BB(I) = B(I)$ ,  $I=7, \dots, 12$ .
- AA : matriz real, precisão dupla, de dimensão igual a  $6 \times 6$  . É uma matriz de trabalho, definida por:  $AA(I,J) = A(I,J)$ ,  $I,J = 7, \dots, 12$ .
- AUX : matriz real, precisão dupla, de dimensão pelo menos igual a  $6N \times 13$ . É uma matriz de trabalho, que contém a matriz ampliada do sistema linear (19) cap. IV na forma triangular superior.

- IE : vetor inteiro, de dimensão igual a 4, que contém os índices dos coeficientes da combinação linear que representa a densidade de elétrons em cada elemento finito.
- IH : vetor inteiro, de dimensão igual a 4, que contém os índices dos coeficientes da combinação linear que representa a densidade de lacunas em cada elemento finito.
- IV : vetor inteiro, de dimensão igual a 4, que contém os índices dos coeficientes da combinação linear que representa o potencial eletrostático em cada elemento finito.
- DP, DN, DEBYE, TAUN, CEE, CEL, EPS, TEST: estão descritos no próprio programa.

#### SUBROUTINE MEG

Calcula as matrizes elementares M, H, K e o vetor elementar F, como seus elementos são dados por meio de integrais, utilizamos quadratura Gaussiana com seis pontos de integração.

#### Descrição dos Parâmetros

M, H, K, F: estão descritos na subrotina FESDS.

## Descrição das Variáveis Utilizadas

- T : vetor real, precisão dupla, de dimensão igual a 6. É um vetor de trabalho, que contém os zeros do polinômio de Legendre de grau 6.
- A : vetor real, precisão dupla, de dimensão igual a 6. É um vetor de trabalho, que contém os pesos para o método de integração Gaussiana.
- X : vetor real, precisão dupla, de dimensão igual a 6. É um vetor de trabalho, indicando uma mudança de variável por meio de uma transf. linear, que leva os zeros do polinômio de Legendre contidos no intervalo  $(-1, 1)$ , no intervalo  $(0, \text{step})$ .
- PHI : vetor real, precisão dupla, de dimensão igual a 4. Cada uma de suas componentes contém a expressão analítica das funções de Hermite cúbicas, descritas no cap. II e ilustradas pelas Figs. 2.5, 2.6, 2.7 e 2.8.
- DPHI : vetor real, precisão dupla, de dimensão igual a 4. Cada uma de suas componentes contém a expressão das derivadas das funções de Hermite cúbicas.

## SUBROUTINE SHAPE

Contém as expressões das funções de Hermite cúbicas.

## Descrição dos Parâmetros

X, PHI : estão descritos na subrotina MEG.

## SUBROUTINE DSHAPE

Contém as expressões das derivadas das funções de Hermite cúbicas.

## Descrição dos Parâmetros

X, DPHI : estão descritos na subrotina MEG.

## SUBROUTINE GAUSS

Através do método de Gauss com pivotamento, efetua a eliminação das seis primeiras variáveis da matriz ampliada  $A|B$ , que é construída em cada elemento finito, e posteriormente, essas seis primeiras linhas serão guardadas na matriz AUX.

### Descrição dos Parâmetros

A, B : estão descritos na subrotina FESDS.

#### SUBROUTINE SSLTS

Resolve um sistema linear triangular superior e calcula as novas aproximações para as densidades de elétrons e lacunas e para o potencial eletrostático.

### Descrição dos Parâmetros

ELET, HOLE, VOLT, DELTA, AUX, N: estão descritos na subrotina FESDS.

#### FUNCTION SUPNOR

Calcula a norma infinito para um vetor em  $\mathbb{R}^n$ .

#### SUBROUTINE FERMI

Determina os níveis quase - Fermi dos elétrons e lacunas.

### Descrição dos Parâmetros

ELET, HOLE, VOLT, FERN, FERP, TENTER, N: estão descritos no programa principal.

## SUBROUTINE AMPER

Calcula a densidade total de corrente na junção pn, através das equações auxiliares - eqs. (4) e (5) cap. III.

## Descrição dos Parâmetros

ELET, HOLE, VOLT, CURR, IM, N: estão descritos no programa principal.

## Descrição das Variáveis Utilizadas

Q, DN, DP, UN, UP: estão descritos no próprio programa.

Obs. 1: segue em anexo uma listagem do programa.

SUBROU'TINE SSLTS

SUBROUTINE SSLTS(ELET,HOLE,VOLT,DELTA,AUX,N)  
 REAL\*8 ELET(1000),HOLE(1000),VOLT(1000),DELTA(3000),SOMA  
 REAL\*8 AUX(610,13)

RESOLUCAO DO SISTEMA TRIANGULAR SUPERIOR

K = 6\*N  
 DO 10 I=H,(K-1),-1  
 DELTA(I) = AUX(I,13)  
 CONTINUE

K = K-2  
 SOMA = 0.00  
 DO 20 I=1,2  
 K = (H+3) - I  
 SOMA = SOMA + AUX(K,13-I)\*DELTA(K)  
 CONTINUE

DELTA(H) = AUX(H,13) - SOMA

K = H-1  
 DELTA(K) = AUX(K,13)

K = H - 1  
 SOMA = 0.00  
 DO 30 I=1,4  
 K = (H+5) - I  
 SOMA = SOMA + AUX(K,13-I)\*DELTA(K)  
 CONTINUE

DELTA(H) = AUX(H,13) - SOMA

K = H-1  
 DELTA(K) = AUX(K,13)

NN = 5  
 DO 50 I=(H-1),1,-1  
 NN = NN + 1  
 SOMA = 0.00  
 DO 40 J=1,NN  
 JJ = ( I + NN ) + 1  
 SOMA = SOMA + AUX(I,13-J)\*DELTA(JJ-I)

CONTINUE  
 DELTA(I) = AUX(I,13) - SOMA  
 IF(NN.EQ.11) NN = 5  
 CONTINUE

CALC. DA NOVA APROX. P/ GENS. DE ELECTRONS

DO 70 I=1,N  
 DO 60 J=1,2  
 JJ = 6\*(I-1) + J  
 IJ = 2\*(I-1) + J

```

      ELET(IJ) = ELET(IJ) + DELTA(JJ)
60    CONTINUE
70    CONTINUE
C     *****
C     *
C     *   CALC. DA NOVA APROX. P/ DENS. DA LACUNAS   *
C     *
C     *****
      DO 90 I=1,N
      DO 80 J=3,4
      JJ = 6*(I-1) + J
      IJ = 2*(I-1) + (J-2)
      HOLE(IJ) = HOLE(IJ) + DELTA(JJ)
80    CONTINUE
90    CONTINUE
C     *****
C     *
C     *   CALC. DA NOVA APROX. P/ O POTENC. ELETROSTATICO*
C     *
C     *****
      DO 110 I=1,N
      DO 100 J=5,6
      JJ= 6*(I-1) + J
      IJ= 2*(I-1) + (J-4)
      VOLT(IJ) = VOLT(IJ) + DELTA(JJ)
100   CONTINUE
110   CONTINUE
      RETURN
      END
C     *****
C     *
C     *   SUBROU TINE GAUSS   *
C     *
C     *****
      SUBROU TINE GAUSS(A,B,N,K,NR)
      REAL*8 A(12,12),B(12)
      REAL*8 PIVO,C
      N = 6
      IF(K.EQ.(NR-1)) N = N
      DO 50 KK=1,N
      PIVO = DABS(A(KK,KK))
      L = KK
      DO 10 I = (KK + 1),N
      IF(I.EQ.(N+1)) GO TO 10
      IF(PIVO.GT.DABS(A(I,KK))) GO TO 10
      PIVO = DABS(A(I,KK))
      L = I
10    CONTINUE
      PIVO = A(L,KK)
      IF(PIVO.EQ.0.00) GO TO 60
      DO 20 J=1,N
      C = A(L,J)
      A(L,J) = A(KK,J)
      A(KK,J) = C/PIVO
20    CONTINUE
      C = B(L)
      B(L) = B(KK)
      B(KK) = C/PIVO
      DO 40 I = (KK+1),N
      IF(I.EQ.(N+1)) GO TO 40

```

```

C = A(I, KK)
DO 30, J= KK, N
A(I, J) = A(I, J) - C*A(KK, J)
30 CONTINUE
B(I) = B(I) - C*B(KK)
40 CONTINUE
50 CONTINUE
GO TO 70
TYPE 10010
STOP
70 RETURN
10010 FORMAT(5X, 'MATRIZ DO SISTEMA E SINGULAR', //)
END

```

```

C *****
C FUNCTION SUPNOR
C *****
REAL*8 FUNCTION SUPNOR(DELTA, N)
REAL*8 DELTA(3000)
SUPNOR = DABS(DELTA(1))
DO 10 I=2, N
IF(SUPNOR.LT.DABS(DELTA(I))) SUPNOR = DABS(DELTA(I))
10 CONTINUE
RETURN
END

```

```

C *****
C SUBROUTINE SHAPE
C *****
SUBROUTINE SHAPE(PHI, X, A, B)
REAL*8 PHI(4)
REAL*8 A, B, X, H, Z, Y
H = B-A
I = X-A
Z = X+B
PHI(1) = (Z**2)*(H + 2*Y)/H**3
PHI(2) = Y*(Z**2)/H**2
PHI(3) = (Y**2)*(H - 2*Z)/H**3
PHI(4) = (Y**2)*Z/H**2
RETURN
END

```

```

C *****
C SUBROUTINE DSHAPE
C *****
SUBROUTINE DSHAPE(DPHI, X, A, B)
REAL*8 DPHI(4)
REAL*8 A, B, X, H, Z, Y
H = B-A
I = X-A
Z = X+B
DPHI(1) = (2*Z*(H + 2*Y) + 2*(Z**2))/H**3
DPHI(2) = (Z**2 + 2*Z*Y)/H**2
DPHI(3) = (2*Y*(H - 2*Z) - 2*(Y**2))/H**3
DPHI(4) = (2*Y*Z + Y**2)/H**2
RETURN
END

```





```

C      IV(4) = 12
C      ***      ***      ***      ***
C      LIMITE MAXIMO DE ITERACOES PARA O METODO DE NEWTON(LIMAX)
C      LIMAX = 10
C      PRECISAO EXIGIDA PARA O RESIDUO(EPS)
C      EPS = 1.D-10
C      *****
C      DESCRICAO DOS FATORES DE NORMALIZACAO      *
C      *****      *
C      COMPRIMENTO DE DEBYE(LD) EM 300K      *
C      LD1 = CM
C      GERMANIO
C      DEBYE(1) = 8.D-5
C      SILICIO
C      DEBYE(2) = 3.D-3
C      COEFICIENTE DE DIFUSAO PARA ELETRONS ( DN )
C      LDN1 = CM2/SEC
C      GERMANIO
C      DN(1) = 1.D2
C      SILICIO
C      DN(2) = 3.5D1
C      COEFICIENTE DE DIFUSAO PARA LACUNAS ( DP )
C      LDP1 = CM2/SEC
C      GERMANIO
C      DP(1) = 5.D1
C      SILICIO
C      DP(2) = 1.2D1
C      *****
C      CHAMADA DA SUBROUTINE MEG      *
C      *****      *
C      TYPE 10010
C      STEP = X(2) - X(1)
C      CALL MEG(M,K,H,F,STEP)
C      *****
C      INICIO DO PROCESSO ITERATIVO      *
C      *****      *
C      ITER = 0
10      ITER = ITER + 1
C      TYPE 10020 , ITER
C      ***      ***      ***      ***
C      DO 30 I=1,6
C      BB(I) = 0.D0
C      DO 20 J=1,6
C      AA(I,J) = 0.D0
20      CONTINUE
30      CONTINUE
C      ***      ***      ***      ***
C      DO 50 J=1,13
C      DO 40 I=1,6*N
C      AUX(I,J) = 0.D0
40      CONTINUE
50      CONTINUE
C      *****
C      DESCRICAO DAS CONST. FISICAS NA REGIAO TIPO P      *

```

```

C
C
C *****
C DENSIDADE DE IMPUREZAS NA REGIAO TIPO P ( P >> N )
C DOP = - ACEPTE
C DENSIDADE DE ELETRONS EM EQUILIBRIO NA REGIAO TIPO P
C CEE = 1.00/ACEPTE
C DENSIDADE DE LACUNAS EM EQUILIBRIO NA REGIAO TIPO P
C CEL = ACEPTE
C TEMPO DE RECOMBINACAO NA REGIAO TIPO P
C (TAU) = SEC
C TAUN = 1.0-5
C TAUP = 1.0-5
C NORMALIZACAO
C TAUN = ( TAUN*DN(IM) ) / ( DEBYE(IM)**2 )
C TAUP = ( TAUP*DP(IM) ) / ( DEBYE(IM)**2 )
C *****
C
C INICIO DO LOOP PRINCIPAL *
C
C
C KK INDICA O NUMERO DO ELEMENTO *
C FINITO NO QUAL ESTAMOS TRABALHANDO *
C DO *
C
C *****
C DO 610 KK=1,(N-1)
C KKK = 2*(KK-1)
C
C *** ***
C DO 70 I=1,12
C B(I) = 0.00
C DO 60 J=1,12
C A(I,J) = 0.00
C CONTINUE
C CONTINUE
C
C *** ***
C DO 90 I=1,4
C SYST(I) = 0.00
C DO 80 J=1,4
C JACOB(I,J) = 0.00
C CONTINUE
C CONTINUE
C
C *****
C
C
C CALCULO DO SISTEMA NAO-LINEAR *
C
C
C *****
C
C (1) EQUACAO DE POISSON *
C
C *****
C DO 110 I=1,4
C SOMA = 0.00
C DO 100 J=1,4
C JJ = KKK + J
C SOMA = SOMA+K(I,J)*VOLT(JJ)+M(I,J)+(ELET(JJ)-HOLE(JJ))
C CONTINUE
C
C *** ***
C
C DENSIDADE DE IMPUREZAS NA REGIAO TIPO N ( N >> P )
C IF(SNGL(X(KK)),EQ,SNGL(DRP)) DOP = DONDR
C
C *** ***
C
C SYST(I) = -DOP*F(I) + SOMA

```

```

110 CONTINUE
C   ***   ***   ***   ***
DO 120 I=1,4
  S(IK(I)) = SYST(I)
120 CONTINUE
C *****
C
C   TESTE P/ VERIF. SE ESTAMOS EM UMA REGIAO TIPO *
C   P OU TIPO N *
C *
C   IK(SNGL(X(KK)),NE,SNGL(DRP)) GO TO 130
C *****
C
C   DESCRICAO DAS CONST. NA REGIAO TIPO N *
C *
C *****
C   DENSIDADE DE ELETRONS EM EQUILIBRIO NA REGIAO TIPO N
  CEE = DONOR
C   DENSIDADE DE LACUNAS EM EQUILIBRIO NA REGIAO TIPO N
  CEL = 1.00/DONOR
C   TEMPO DE RECOMBINACAO NA REGIAO TIPO N
  (TAU) = SEC
  TAUN = 1.0E-5
  TAUP = 1.0E-5
C   NORMALIZACAO
  TAUN = ( TAUN*DN(IM) ) / ( DEBYE(IM)**2 )
  TAUP = ( TAUP*DP(IM) ) / ( DEBYE(IM)**2 )
C *****
C
C   (2) EQUACAO DE CONTINUIDADE PARA ELETRONS *
C *
C *****
130 DO 160 I=1,4
  SOMA = 0.00
  DO 150 J=1,4
    JJ = KKK + J
    DO 140 JK=1,4
      JJK = KKK + JK
      SOMA = SOMA + H(I,J,JK)*ELET(JJ)*VOLT(JJK)
140 CONTINUE
150 CONTINUE
  SYST(I) = SOMA + F(I)*CEE/TAUN
160 CONTINUE
  DO 180 I=1,4
    SOMA = 0.00
    DO 170 J=1,4
      JJ= KKK + J
      SOMA = SOMA + ( K(I,J)+H(I,J)/TAUN)*ELET(JJ)
170 CONTINUE
  SYST(I) = SYST(I) - SOMA
180 CONTINUE
C   ***   ***   ***   ***
DO 190 I=1,4
  S(IV(I)) = SYST(I)
190 CONTINUE
C *****
C
C   (3) EQUACAO DE CONTINUIDADE PARA LACUNAS *
C *
C *****

```

```

200 DO 220 I=1,4
    SOMA = 0.00
    DO 210 J=1,4
        JJ = KKK + J
        DO 200 JK = 1,4
            JJK = KKK + JK
            SOMA = SOMA + H(I,J,JK)*HOLE(JJ)*VDLT(JJK)

```

```

210 CONTINUE
220 CONTINUE
    SYST(I) = SOMA - F(I)*CEL/TAUP

```

```

230 CONTINUE
    DO 240 I=1,4
        SOMA = 0.00
        DO 230 J=1,4
            JJ = KKK + J
            SOMA = SOMA + (K(I,I)+K(I,J)/TAUP)*HOLE(JJ)

```

```

240 CONTINUE
    SYST(I) = SYST(I) + SOMA

```

```

250 C    ***      ***      ***      ***

```

```

    DO 250 I=1,4
        B(I) = SYST(I)

```

```

260 C    ***      ***      ***      ***

```

```

    DO 260 I=1,6
        B(I) = B(I) + RB(I)

```

```

270 C    ***      ***      ***      ***

```

```

    DO 270 I=1,12
        B(I) = - B(I)

```

```

280 C    CONTINUE
    *****

```

```

    CALCULO DO JACOBIANO DO SIST. NAO-LINEAR

```

```

    *****

```

```

290 DO 290 I=1,4
    DO 280 J=1,4
        A(IE(I),IE(J)) = H(I,J)
        A(IE(I),IH(J)) = -H(I,J)
        A(IE(I),IV(J)) = K(I,J)

```

```

300 C    CONTINUE
310 C    CONTINUE
    ***      ***      ***      ***

```

```

    DO 320 I=1,4
        DO 310 J=1,4
            SOMA = 0.00
            DO 300 JK=1,4
                JJK = KKK + JK
                SOMA = SOMA + H(I,J,JK)*VDLT(JJK)

```

```

320 C    CONTINUE
    JACOB(I,J) = SOMA + K(I,J) + K(I,J)/TAUP

```

```

330 C    CONTINUE
    ***      ***      ***

```

```

    DO 340 I=1,4
        DO 330 J=1,4
            A(IH(I),IH(J)) = JACOB(I,J)

```

```

340 C    CONTINUE
350 C    CONTINUE

```

```

C      ***      ***      ***
DO 370 I=1,4
DO 360 JK=1,4
SOMA = 0.00
DO 350 J=1,4
JJ = KKK + J
SOMA = SOMA + H(I,J,JK)*HOLE(JJ)
350 CONTINUE
JACOB(I,JK) = SOMA
360 CONTINUE
370 CONTINUE
C      ***      **      ***      ***
DO 390 I=1,4
DO 380 J=1,4
A(IH(I),IV(J)) = JACOB(I,J)
380 CONTINUE
390 CONTINUE
C      ***      ***      ***      ***
C      ***      **      ***      ***
DO 420 I=1,4
DO 410 J=1,4
SOMA = 0.00
DO 400 JK =1,4
JJK = KKK + JK
SOMA = SOMA + H(I,J,JK)*VOLT(JJK)
400 CONTINUE
JACOB(I,J) = SOMA - ( M(I,J)/TAUN + K(I,J) )
410 CONTINUE
420 CONTINUE
C      ***      ***      ***      ***
DO 440 I=1,4
DO 430 J=1,4
A(IV(I),IE(J)) = JACOB(I,J)
430 CONTINUE
440 CONTINUE
C      ***      ***      ***      ***
DO 470 I=1,4
DO 460 JK=1,4
SOMA = 0.00
DO 450 J=1,4
JJ = KKK + J
SOMA = SOMA + H(I,J,JK)*ELET(JJ)
450 CONTINUE
JACOB(I,JK) = SOMA
460 CONTINUE
470 CONTINUE
C      ***      ***      ***      ****
DO 490 I=1,4
DO 480 J=1,4
A(IV(I),IV(J)) = JACOB(I,J)
480 CONTINUE
490 CONTINUE
C      ***      ***      ***      ***
DO 510 I=1,6
DO 500 J=1,6
A(I,J) = A(I,J) + AA(I,J)
500 CONTINUE
510 CONTINUE
C      *****
C

```

CONDICOES DE CONTORNO

```

*****
IF(KK.EQ.1) GO TO 520
IF(KK.EQ.(N-1)) GO TO 540
GO TO 560
520 DO 530 I=1,12
A(1,I) = 0.00
A(3,I) = 0.00
A(5,I) = 0.00
530 CONTINUE
A(1,1) = 1.00
B(1) = 0.00
A(3,3) = 1.00
B(3) = 0.00
A(5,5) = 1.00
B(5) = 0.00
GO TO 560
540 DO 550 I=1,12
A(7,I) = 0.00
A(9,I) = 0.00
A(11,I) = 0.00
550 CONTINUE
A(7,7) = 1.00
B(7) = 0.00
A(9,9) = 1.00
B(9) = 0.00
A(11,11) = 1.00
B(11) = 0.00
*****

```

CHAMADA DA SUBROUTINE GAUSS

```

*****
560 KL = KK
CALL GAUSS(A,B,12,KL,N)
*****
DO 580 I=1,6
BB(I) = -B(I+6)
DO 570 J=1,6
AA(I,J) = A(I+6,J+6)
570 CONTINUE
580 CONTINUE
*****

```

CONSTRUÇÃO DA MATRIZ AUX(I,J)

```

*****
590 MM = 6
IF(KK.EQ.(N-1)) MM = 12
DO 600 I=1,MM
KI = 6*(KK-1) + 1
AA(KI,13) = B(I)
DO 590 J= 1,12
AUX(KI,J) = A(I,J)
590 CONTINUE
600 CONTINUE
*****
FIM DO LOOP PRINCIPAL
*****

```

```

C *****
610 CONTINUE
C *****
C C C C
C CHAMADA DA SUBROUTINE SSLTS
C *****
C CALL SSLTS(ELET,HOLE,VOLT,DELTA,AUX,N)
C *****
C L = 6*N
C TEST = SUPNOR(DELTA,L)
C TYPE 10030 , TEST
C *** **
C DO 620 I=1,L
C DELTA(I) = AUX(I,13)
620 CONTINUE
C *** **
C TEST = SUPNOR(DELTA,L)
C TYPE 10040, TEST
C IF(TEST.LE.EPS) GO TO 630
C IF(ITER.GT.LI*AX) STOP
C GO TO 10
C *** **
630 WRITE(60,10050)
C WRITE(60,10060) ITER,TEST
C RETURN
10010 FORMAT(5X,'CHAMEI A SUBROUTINE MEG ',//)
10020 FORMAT(10X,'ITERACAO = ',I2)
10030 FORMAT(10X,'ERRO ABSOLUTO = ',G)
10040 FORMAT(10X,'RESIDUO = ',G)
10050 FORMAT(2X,'FOI UTILIZADO O METODO DE NEWTON P/ RESOLVER
1 O SISTEMA NAO*LINEAR',//)
10060 FORMAT(5X,'O METODO CONVERGIU EM ',I2,' ITERACOES',
1 /,5X,'COM UM RESIDUO = ',G,///,5X,70('*'),///)
C END
C *****
C C C C C
C SUBROUTINE VIMN
C *****
C SUBROUTINE VIMN(X,ELET,HOLE,VOLT,DES,DED,DLS,DLG,VS,VD,N)
C REAL*8 X(500),ELET(1000),HOLE(1000),VOLT(1000)
C REAL*8 DES,DED,DLS,DLG,VS,VD
C *****
C CALCULO DAS APROXIMACOES INICIAIS PARA AS DENS. *
C DE ELETRONS E LACUNAS E PARA O POTENCIAL ELETRON- *
C TATICO, QUE SERA UTILIZADA PARA INICIAR O METO- *
C DO DE NEWTON
C *****
C DO 10 I=1,N
C J = 2*I
C ELET(J-1)=(DED-DES)*(X(I)-X(1))/(X(N)-X(1))+DES
C ELET(J) =(DED-DES)/(X(N)-X(1))
C HOLE(J-1)=(DLG-DLS)*(X(I)-X(1))/(X(N)-X(1))+DLS
C HOLE(J) =(DLG-DLS)/(X(N)-X(1))
C VOLT(J-1)=(VD-VS)*(X(I)-X(1))/(X(N)-X(1))+VS
C VOLT(J) =(VD-VS)/(X(N)-X(1))
10 CONTINUE
C RETURN
C END
C *****

```

SUBROUTINE FERMI

```

*****
SUBROUTINE FERMI(ELET,HOLE,VOLT,PERN,FERP,TENTER,N)
REAL*8 ELET(1000),HOLE(1000),VOLT(1000),FERN(500),FERP(500)
REAL*8 TENTER

```

```

*****
CALCULO DOS NIVEIS QUASI-FERMI PARA
ELETRONS E LACUNAS

```

```

*****
DO 10 I=1,N
  J = 2+I
  FERN(I)=VOLT(J-1) - TENTER*DLOG(ELET(J-1))
  FERP(I)=VOLT(J-1) + TENTER*DLOG(HOLE(J-1))
CONTINUE
RETURN
END

```

SUBROUTINE AMPER

```

*****
SUBROUTINE AMPER(ELET,HOLE,VOLT,CURR,IM,N)
REAL*8 ELET(1000),HOLE(1000),VOLT(1000),CURR(500)
REAL*8 Q,DN(2),DP(2),UN(2),UP(2)

```

```

*****
DESCRICAO DAS CONSTANTES FISICAS

```

```

*****
COEFICIENTE DE DIFUSAO PARA ELETRONS ( UN )

```

UN1 = CM2/SEC

GERMANIO

UN(1) = 1.02

SILICIO

UN(2) = 3.501

```

COEFICIENTE DE DIFUSAO PARA LACUNAS ( DP )

```

DP1 = CM2/SEC

GERMANIO

DP(1) = 5.01

SILICIO

DP(2) = 1.201

```

COEFICIENTE DE MOBILIDADE PARA ELETRONS ( UN )

```

UN1 = CM2/VOLT-SEC

GERMANIO

UN(1) = 3.9D3

SILICIO

UN(2) = 13.502

```

COEFICIENTE DE MOBILIDADE PARA LACUNAS

```

UP1 = CM2/VOLT-SEC

GERMANIO

UP(1) = 1.9D3

SILICIO

UP(2) = 4.7D2

```

CARGA DO ELETRON ( Q )

```

Q1 = COUL

Q = 1.6D-19

```
*****
CALCULO DA DENSIDADE TOTAL DE CORRENTE NA
JUNCAO PN ATRAVES DAS EQUACOES AUXILIARES
*****
```

```
DO 10 I=1,N
J = 2*I
CURR(I) = Q*VOLT(J)*(UN(IM)*ELET(J-1)+UP(IM)*
1 HOLE(J-1)) + Q*(DN(IM)*ELET(J)-DP(IM)*HOLE(J))
CONTINUE
N*JURN
END
```

```
*****
PROGRAMA PRINCIPAL
*****
```

```
REAL*8 X(500),ELET(1000),HOLE(1000),VOLT(1000)
REAL*8 DES,DED,OLS,OLD,VS,VD,TAJ,DRP,DDSC,ACEPTE,DONOR
REAL*8 CPCSI(2),DEBYE(2),TENTER,CURR(500),FERN(500),FERP(500)
OPEN(UNIT=60,FILE='JUNCAO.DAT')
OPEN(UNIT=45,FILE='PLOTER.DAT')
OPEN(UNIT=50,FILE='APROX.DAT')
```

```
*****
DESCRICAO DOS FATORES DE NORMALIZACAO
*****
```

```
*****
DENS. DE PORT. DE CARGA NO SEMICOND. INTRINSECO
INI1 = (NUMERO DE PORTADORES)/CM3
GERMANIO
CPCSI(1) = 2.5D13
SILICIO
CPCSI(2) = 1.5D10
TENSAO TERMICA ( KT/Q )
1K1/Q) = VOLTS
TENTER = 25.0-3
COMPRIMENTO DE DEBYE ( LD ) EM 300K
LDI = CM
GERMANIO
DEBYE(1) = 8.0-5
SILICIO
DEBYE(2) = 3.0-3
```

```
*****
ENTRADA DE DADOS
*****
```

```
*****
TYPE 10010
ACCEPT 10020, 60gC
TYPE 10030
ACCEPT 10040 , DRP
TYPE 10050
ACCEPT 10060, N
TYPE 10070
ACCEPT 10080, DES,DED
TYPE 10090
ACCEPT 10100, OLS,OLD
TYPE 10110
```

```

TYPE 10120
ACCEPT 10130, TAJ
TYPE 10140
ACCEPT 10150, ACEPTE, DONOR
TYPE 10160
TYPE 10170
ACCEPT 10180, IM
TYPE 10190
TYPE 10200
ACCEPT 10210, IC

```

```
*****
```

```
NORMALIZACAO DAS VARIAVEIS *
```

```
*****
```

```

DES = DES/CPCSI(IM)
DED = DED/CPCSI(IM)
DLS = DLS/CPCSI(IM)
OLD = OLD/CPCSI(IM)
ACEPTE = ACEPTE/CPCSI(IM)
DONOR = DONOR/CPCSI(IM)
DRP = DRP/DEBYE(IM)
DDSC = DDSC/DEBYE(IM)

```

```
*****
```

```
CALCULO DO POTENCIAL ELETROSTATICO NOS CONTATOS *
```

```

VS = TENTER*DLOG(DES)
VD = -TAJ + TENTER*DLOG(DED)

```

```
NORMALIZACAO DO POTENCIAL ELETROSTATICO *
```

```

VS = VS/TENTER
VD = VD/TENTER

```

```
*****
```

```
CALCULO DAS COORDENADAS DOS NOS *
```

```
*****
```

```

DO 10 I=1, N
A(I) = DFLOAT(I-1)*DDSC/DFLOAT(N-1)
CONTINUE

```

```
*****
```

```
CHAMADA DA SUBROTINE VIMN *
```

```

IF(IC.EQ.0) GO TO 20
TYPE 10220
CALL VIMN(X, ELET, HOLE, VOLT, DES, DED, DLS, OLD, VS, VD, N)
GO TO 40

```

```
*****
```

```

APROXIMACAO INICIAL DADA PELA *
SOLUCAO ANTERIOR *

```

```
*****
```

```

DO 30 I=1, 2*N
READ(50, 10230) ELET(I), HOLE(I), VOLT(I)
CONTINUE

```

C  
C  
C  
C  
C

C  
C  
C  
C

C  
C  
C

C  
C  
C  
C  
C  
C

10

C  
C  
C  
C

C  
C  
C  
C  
C  
C

20

30



C  
C  
C  
C  
C  
C  
90  
100  
110  
120  
130  
C  
140  
C  
C  
C  
C  
C  
150  
C  
C  
C  
C  
10010  
10020  
10030  
10040  
10050  
10060  
10070  
10080  
10090  
10100  
10110

```

RESULTADOS NO ARQUIVO DE SAIDA
JUNCAO.DAT
*****
TYPE 10280
WRITE(60,10290)
WRITE(60,10300)
DO 90 I=1,N
WRITE(60,10310) I,X(I),I,ELET(2*I-1)
CONTINUE
WRITE(60,10320)
DO 100 I=1,N
WRITE(60,10330) I,X(I),I,HOLE(2*I-1)
CONTINUE
WRITE(60,10340)
DO 110 I=1,N
WRITE(60,10350) I,X(I),I,VOLT(2*I-1)
CONTINUE
WRITE(60,10360)
DO 120 I=1,N
WRITE(60,10370) I,X(I),I,FERN(I)
CONTINUE
WRITE(60,10380)
DO 130 I=1,N
WRITE(60,10390) I,X(I),I,FERP(I)
CONTINUE
***      ***      ***      ***
WRITE(60,10400)
DO 140 I=1,N
WRITE(60,10410) I,X(I),I,CURR(I)
CONTINUE
*****
CRIA UM ARQUIVO PLOTAR.DAT QUE SERA UTILIZADO
PARA PLOTAR A CURVA DAS DENSIDADES DE ELETRONS E
LACUNAS E O POTENCIAL ELETROSTATICO
*****
DO 150 I=1,N
WRITE(45,10420) X(I),ELET(2*I-1),HOLE(2*I-1),VOLT(2*I-1)
CONTINUE
*****
STOP
*****
FORMAT DA ENTRADA DE DADOS
*****
FORMAT(5X,'DIMENSAO DO DISPOSITIVO ==> ',5)
FORMAT(G)
FORMAT(5X,'DIMENSAO DA REGIAO TIPO P ==> ',5)
FORMAT(G)
FORMAT(5X,'DE O NUMERO DE NOS ==> ',5)
FORMAT(G)
FORMAT(5X,'DE A DENSIDADE DE ELETRONS NOS CONTATOS ==> ',5)
FORMAT(2G)
FORMAT(5X,'DE A DENSIDADE DE LACUNAS NOS CONTATOS ==> ',5)
FORMAT(2G)
FORMAT(5X,'TENSAO APLICADA',T40,'POLARIZACAO',//,

```

```

1 10X,'POSITIVA',T45,'DIRETA',//,
2 10X,'NEGATIVA',T45,'INVERSA',//)
10120 FORMAT(5X,'TENSAO APLICADA NA JUNCAO ==> ',S)
10130 FORMAT(G)
10140 FORMAT(5X,'DENSIDADE DA DOPAGEM(ACCEPT AND DONOR) ==>',S)
10150 FORMAT(2G)
10160 FORMAT(5X,'MATERIAL INTRINSECO',T40,'CODIGO',//,
1 10X,'GERMANIO',T44,'1',//,
2 10X,'SILICIO ',T44,'2',//)
10170 FORMAT(5X,'CODIGO DO MATERIAL INTRINSECO ==> ',S)
10180 FORMAT(G)
10190 FORMAT(5X,'APROXIMACAO INICIAL',T40,'CODIGO',//,
1 5X,'SOLUCAO ANTERIOR',T44,'0',//,
2 5X,'UMA RETA',T44,'1',//)
10200 FORMAT(5X,'CODIGO DA APROXIMACAO INICIAL ==> ',S)
10210 FORMAT(G)
C *****
10220 FORMAT(5X,'CHAMEI A SUBROUTINE VIMM',//)
10230 FORMAT(3G)
10240 FORMAT(5X,'CHAMEI A SUBROUTINE FESDS',//)
10250 FORMAT(5X,G,5X,G,5X,G)
10260 FORMAT(///,5X,'CHAMEI A SUBROUTINE FERMI',//)
10270 FORMAT(5X,'CHAMEI A SUBROUTINE AMPER',//)
10280 FORMAT(///,5X,'ESTOU CRIANDO O ARQUIVO DE SAIDA JUNCAO.DAT',//)
C *****
C *
C *
C *
C *****
10290 FORMAT(5X,'METODO DE ELEMENTOS FINITOS',/,5X,
1 'EM SIMULACAO DE DISPOSITIVOS SEMICONDUTORES',/,5X,
2 'USANDO COMO BASE AS FUNCOES DE HERMITE CUBICAS',///,15X,
3 '**** METODO DE GALERKIN ****',///,30X,
4 '**** IMPLEMENTACAO DO METODO FRONTAL ****',///,20X,
5 '*** SIMULACAO DE UMA JUNCAO PN ABRUPTA SIMETRICA ***',///)
10300 FORMAT(5X,'DENSIDADE DE ELETRONS = N(X) ',//)
10310 FORMAT(5X,'X(',I3,') = ',G,10X,'N(',I3,') = ',G,/)
10320 FORMAT(///,5X,'DENSIDADE DE LACUNAS = P(X) ',//)
10330 FORMAT(5X,'X(',I3,') = ',G,10X,'P(',I3,') = ',G,/)
10340 FORMAT(///,5X,'POTENCIAL ELETROSTATICO = V(X) ',//)
10350 FORMAT(5X,'X(',I3,') = ',G,10X,'V(',I3,') = ',G,/)
10360 FORMAT(///,5X,'NIVEL FERMI DOS ELETRONS',//)
10370 FORMAT(5X,'X(',I3,') = ',G,10X,'FERM(',I3,') = ',G,/)
10380 FORMAT(///,5X,'NIVEL FERMI DAS LACUNAS',//)
10390 FORMAT(5X,'X(',I3,') = ',G,10X,'FERP(',I3,') = ',G,/)
10400 FORMAT(///,5X,'CORRENTE TOTAL ',//)
10410 FORMAT(5X,'X(',I3,') = ',G,10X,'CURR(',I3,') = ',G,/)
10420 FORMAT(1X,4G)
END

```

## REFERÊNCIAS

- [1] Barnes, J.J. and Lomax, R.J. - Finite Element Methods in Semiconductor Device Simulation, IEEE Transactions on Electron Devices, Vol. 24, nº 8, August 1977.
- [2] Ciarlet, P.G. - The Finite Element Method for Elliptic Problems, North - Holland, 1979.
- [3] Gray, P.E. e Searle, C.L. - Princípios de Eletrônica, Livros Técnicos e Científicos Editora S.A., Vol. 1, 1977.
- [4] Linz, P. - Theoretical Numerical Analysis, Wiley - Interscience, New York, 1979.
- [5] Mock, M.S. - An Initial Value Problem from Semiconductor Device Theory, SIAM J. Math. Anal., 5 (1974), 597 - 612.
- [6] Mock, M.S. - On Equations Describing Steady State Carrier Distributions in a Semiconductor Device, Communications on Pure and Applied Mathematics, Vol. XXV, 781 - 792, 1972.
- [7] Prenter, P.M. - Splines and Variational Methods, Wiley - Interscience, New York, 1975.
- [8] Schultz, M.H. - Spline Analysis, Prentice-Hall, 1973.
- [9] Strang, G. and Fix, G.J. - An Analysis of the Finite Element Method, Prentice - Hall, 1973.
- [10] Shalimova, K.V. - Física de los Semiconductores, Editorial Mir, 1975.