

# Convergence

## Résolution des systèmes d'équations non-linéaires

La discrétisation des équations de Poisson, transport N et N et piégeage N et P aboutit à un système d'équations non linéaires :

$$\{E(X)\} = \begin{pmatrix} e_1(X) \\ e_2(X) \\ \dots \\ e_n(X) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \dots \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{dépendant des inconnues : } \{X\} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \dots \\ x_n \end{pmatrix}$$

avec :

$e_1(X), e_2(X), \dots, e_n(X)$  les équations de Poisson, transport N et N et piégeage N et P aux nœuds.

$x_1, x_2, \dots, x_n$  les potentiels et densités de porteurs libres et piégés N et P aux nœuds appelés par la suite 'degrés de liberté'.

$$\text{Soit le jacobien : } \{J(X)\} = \begin{pmatrix} \frac{\partial e_1(X)}{\partial x_1} & \frac{\partial e_1(X)}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial e_1(X)}{\partial x_n} \\ \frac{\partial e_2(X)}{\partial x_1} & \frac{\partial e_2(X)}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial e_2(X)}{\partial x_n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial e_n(X)}{\partial x_1} & \frac{\partial e_n(X)}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial e_n(X)}{\partial x_n} \end{pmatrix} \quad \text{et le vecteur : } \{\Delta X\} = \begin{pmatrix} \delta x_1 \\ \delta x_2 \\ \dots \\ \delta x_n \end{pmatrix}$$

Ce système d'équations non-linéaire est résolu par la méthode de Raphson-Newton. C'est une méthode itérative qui, à partir d'une solution initiale estimée, va s'approcher de la solution par corrections successives.

1<sup>ère</sup> étape : choix d'une solution initiale notée :  $\{X_0\}$  sur des critères physiques (potentiel à 0, densité de porteurs à la valeur d'équilibre, ...)

2<sup>ème</sup> étape : calcul de la correction  $\{\Delta X_1\}$  à apporter à  $\{X_0\}$  par résolution de l'équation :  
 $[J(X_0)]\{\Delta X_1\} = -\{E(X_0)\}$

et correction de la solution :

$$\{X_1\} = \{X_0\} + \{\Delta X_1\}$$

3<sup>ème</sup> étape : calcul de la correction  $\{\Delta X_2\}$  à apporter à  $\{X_1\}$  par résolution de l'équation :  
 $[J(X_1)]\{\Delta X_2\} = -\{E(X_1)\}$

et correction de la solution :

$$\{X_2\} = \{X_1\} + \{\Delta X_1\}$$

et ainsi de suite jusqu'à convergence du système vers une solution stable.

## Critère de convergence

Le contrôle de la convergence est un problème complexe. En fonction de la nature des degrés de liberté (potentiel, densité de porteurs) et même de la position dans le dispositif (jonctions PN) la valeur peut varier de plusieurs ordres de grandeur.

Pour cette raison les critères de convergence similaires à celui-ci sont inapplicables :

$$\left(\sum_{i=1}^n |\delta x_i|\right) / n < \text{variation maximum}$$

Dans certains cas ce critère peut donner de bons résultats :

$$\left(\sum_{i=1}^n |e_i(X)|\right) / n < \text{résidu maximum}$$

mais la relation entre résidu obtenu et précision effective des degrés de liberté n'est pas évidente.

De plus, les unités des équations changent (Poisson en C/m<sup>3</sup>, transport en C/m<sup>3</sup>/s) et par conséquent les valeurs des résidus peuvent changer fortement d'une équation à l'autre.

Pour ces raisons E.CO.R.C.E utilise ce critère de convergence relatif :

$$\left(\sum_{i=1}^n |\delta x_{\text{relatif}}|\right) / n < \text{précision relative maximum} \quad \text{avec} \quad \delta x_{\text{relatif}} = \frac{\delta x_i}{\max_{\text{degré}} + \text{seuil}_{\text{degré}}}$$

avec  $\max_{\text{degré}}$  valeur maximum du degré de liberté sur l'ensemble du dispositif  
 $\text{seuil}_{\text{degré}}$  valeur seuil à partir de laquelle le degré de liberté peut être considérée nul.

La valeur seuil est prépondérante lorsque le degré de liberté est voisin de 0 dans la totalité du dispositif (par exemple le potentiel dans un barreau homogène non polarisé).

## Équation et convergence

Considérons l'équation de piégeage -dépiégeage N sur un niveau i ([\[CIRBA96 page 33-34\]](#)) :

$$q \frac{\partial n_t^{(i)}}{\partial t} = \sigma_{nt}^{(i)} (|\vec{J}_n| + J_{thn}) (N_n^{(i)} - n_t^{(i)}) - \sigma_{pr}^{(i)} (|\vec{J}_p| + J_{thp}) n_t^{(i)} - q R_n^{(i)} n_t^{(i)}$$

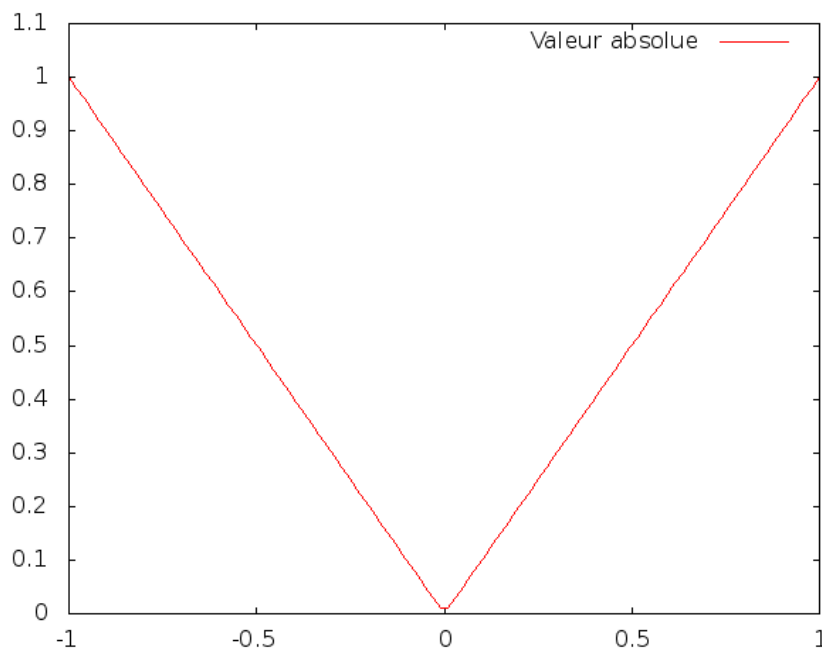
avec  $R_n^{(i)} = \sigma_{nt}^{(i)} V_{thn} N_c e^{-q(E_c - E_n^{(i)})/kT}$

Deux composantes du courant contribuent au piégeage et à la recombinaison : le courant dû au transport :  $\vec{J}_n = q n \mu \vec{E} + q D_n \vec{\nabla} n$  et le courant dû à l'agitation thermique :  $J_{thn} = q n v_{thn}$  avec :  $v_{thn}$  la vitesse d'agitation thermique des électrons. ([\[CIRBA96 page 38\]](#))

Cette équation comporte une dérivée partielle dépendant du temps :  $\frac{\partial n_t^{(i)}}{\partial t}$  et aucun terme différentiel dépendant de l'espace. En apparence, elle devrait être plus simple à résoudre que les équations de Poisson et de transport.

Comme nous venons de le voir, pour résoudre le système d'équations non-linéaires, nous utilisons la matrice jacobienne qui comporte les dérivées premières des équations par rapport aux degrés de liberté

Or l'équation de piégeage comporte les valeurs absolues :  $|\vec{J}_n|$  et  $|\vec{J}_p|$  et les dérivées premières de ces termes par rapport à  $\Psi$ , n et p sont discontinues pour  $\vec{J}_n = \vec{J}_p = 0$ .



Lorsque le courant s'inverse en un point du dispositif, certaines dérivées de la matrice jacobienne varient brutalement au cours des itérations de Raphson-Newton. Le résultat oscille alors autour de la solution sans parvenir à converger.

Pour éviter ces oscillations, je pondère cette fonction de façon à obtenir une dérivée qui tend vers 0 au voisinage de 0 :  $\frac{|(x)|}{1+(seuil/x)^4}$  avec seuil : le seuil de précision de la valeur x

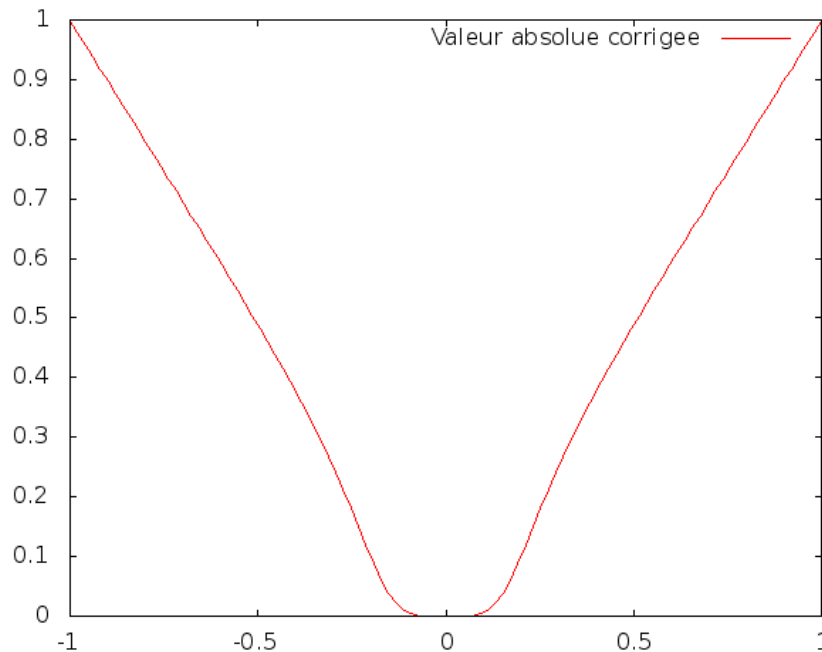


Illustration 1: Valeur absolue pour seuil = 0.2

Pour le calcul du courant de l'équation de piégeage, il suffit d'utiliser  $seuil = v_{thn}$  et le calcul du courant :  $(|\vec{J}_n| + J_{thn})$  devient :  $\frac{|\vec{J}_n|}{1+(J_{thn}/x)^4} + J_{thn}$

Cette forme du courant a des dérivées premières par rapport à  $\Psi$ , n et p continues sur l'ensemble du domaine.

Des problèmes similaires apparaissent avec les fonctions racine carré, puissance, ..., comme dans cette formule de calcul de la mobilité des porteurs en fonction des densités de porteur (formule

d'Adler) : 
$$\mu = \frac{c_1}{\sqrt{np} \ln(1 + c_2(np)^{-1/3})}$$

Ces types de fonction sont donc systématiquement pondérés par cette méthode.