

**ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ АЛГОРИТМЫ ДЛЯ ОДНОМЕРНОЙ МЕР МОДЕЛИ  
ПЕРЕНОСА ЗАРЯДА В ПОЛУПРОВОДНИКАХ**

**Шевченко Алеся Сергеевна**

*кандидат физико-математических наук, доцент,  
Рубцовский индустриальный институт (филиал),  
Алтайский государственный технический университет им. И. И. Ползунова  
Рубцовск, Россия  
E-mail: ibragimova.a.s@mail.ru*

*Предмет исследования: гидродинамическая модель, описывающая перенос заряда в полупроводниковых устройствах в одномерном случае.*

*Цель исследования: разработать вычислительные алгоритмы для нахождения численного решения задачи о баллистическом диоде.*

*Методы и объекты исследования: объектом исследования является задача о баллистическом диоде. Разработанные вычислительные алгоритмы основаны на использовании метода прямых, метода установления, различных нестационарных регуляризаций и схем без насыщения.*

*Основные результаты исследования: разработаны вычислительные схемы, построенные на использовании техники сплайн-функции, на сведении задачи к интегральным уравнениям и использовании схемы предиктор-корректор.*

*Ключевые слова: баллистический диод, регуляризации, интерполяция сплайнами, метод установления, интегральные уравнения.*

**COMPUTATIONAL ALGORITHMS FOR A ONE-DIMENSIONAL MER MODEL OF  
CHARGE TRANSFER IN SEMICONDUCTORS**

**Alesya S. Shevchenko**

*Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor  
Rubtsovsk Industrial Institute (branch),  
Altai State Technical University named after I. I. Polzunov  
Rubtsovsk, Russia  
E-mail: ibragimova.a.s@mail.ru.ru*

*Subject of research: hydrodynamic model describing charge transfer in semiconductor devices in the one-dimensional case.*

*Purpose of research: to develop computational algorithms for finding a numerical solution of a ballistic diode problem.*

*Methods and objects of research: the object of research is the ballistic diode problem. The developed computational algorithms are based on the use of the method of lines, the method of establishment, various non-stationary regularizations and schemes without saturation.*

*Main results of the research: computational schemes were developed based on the use of the spline function technique, on reducing the problem to integral equations and using the predictor-corrector scheme.*

*Keywords: ballistic diode, regularizations, spline interpolation, settling method, integral equations.*

**Введение**

В настоящий момент существует огромное число математических моделей, предназначенных для описания физических явлений в полупроводниковых устройствах. Поскольку поиск приближенных решений затруднителен, то встает вопрос о разработке численных алгоритмов нахождения приближенных решений. В работе рассматривается одномерный вариант МЕР (Maximum Entropy Principle) модели [1].

Безразмерная математическая модель, описывающая перенос заряда в полупроводнике имеет следующий вид [2]:

$$\left. \begin{aligned} R_t + J_x &= 0, \\ J_t + \left(\frac{2}{3}RE\right)_x &= RQ + c_{11}J + c_{12}I, \\ (RE)_t + I_x &= JQ + cP, \\ I_t + \left(\frac{10}{9}RE^2\right)_x &= \frac{5}{3}REQ + c_{21}J + c_{22}I, \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

$$\varepsilon\varphi_{xx} = R - \rho. \quad (2)$$

Где  $R$  – плотность электронов,  $u$  – скорость электронов,  $q$  – поток энергии,  $J = Ru$ ,  $I = Rq$ ,  $\varphi$  – электрический потенциал,  $Q = \varphi_x$ ,  $E$  – энергия электронов,  $\sigma = \frac{2}{3}E - 1$ ,  $P = R\sigma$ ,  $\varepsilon > 0$  –

константа,  $\rho = \rho(x)$ ,  $c, c_{11}, c_{12}, c_{21}, c_{22}$  – коэффициенты, зависящие от энергии  $E$  [2,3].

Системе уравнений (1) задали граничные условия (3), начальные данные (4), а уравнению Пуассона (2) поставили краевые условия (5):

$$\left. \begin{aligned} R(t,0) = R(t,1) &= 1, \\ E(t,0) = E(t,1) &= \frac{3}{2}, \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

$$\left. \begin{aligned} R(0,x) &= R_0(x), \\ J(0,x) &= J_0(x), \\ E(0,x) &= E_0(x), \\ I(0,x) &= I_0(x), \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

$$\varphi(t,0) = 0, \quad \varphi(t,1) = B, \quad (5)$$

$$B > 0, \quad R_0(x) > 0, \quad E_0(x) > 0.$$

Сформулированная задача (1) – (5) является одномерной задачей о баллистическом диоде. Это полупроводниковый прибор, состоящий из трех областей. Первую и третью области называют  $n^+$ -зонами. Они имеют высокую концентрацию легирования. Средняя область имеет низкую концентрацию легирования и называется  $n$ -зоной.

Безразмерная величина  $\rho$  имеет следующий вид:

$$\rho = \begin{cases} 1, & \text{если } x \text{ принадлежит } n^+ \text{ - зоне,} \\ \delta = \frac{N^+}{N}, & \text{если } x \text{ принадлежит } n \text{ - зоне,} \end{cases}$$

$N, N^+$  являются плотностями легирования в  $n$ -зоне,  $n^+$  -зоне. График  $\rho(x)$  изображен на рисунке 1.

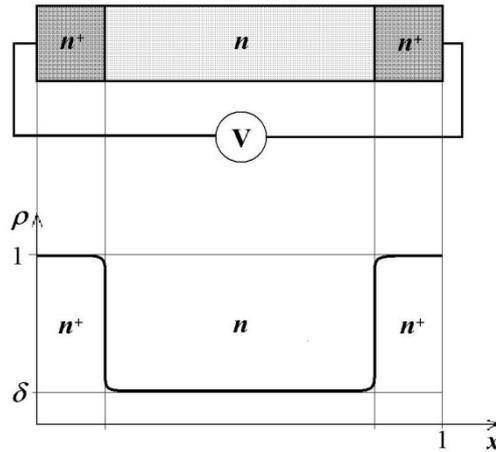


Рисунок 1 – Схематическое изображение  $n^+ - n - n^+$  баллистического диода

При осуществлении поиска приближенных решений в данной задаче возникли вычислительные проблемы, связанные с тем, что уравнения модели являются нелинейными уравнениями и содержат очень малые параметры. В задаче не удалось найти приближенные решения с помощью разностных схем. Основные проблемы возникли с нахождением энергии электронов. Энергия электронов очень сильно увеличивалась, и происходило переполнение системы.

### Результаты и обсуждение

Для нахождения приближенных решений задачу (1) – (5) в стационарном случае удалось свести к системе из трех уравнений Пуассона [4]:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d^2 \varphi}{dx^2} = \mathcal{F}^{(\varphi)}(\chi, \rho) = \beta(e^{\chi} - \rho), \\ \frac{d^2 \sigma}{dx^2} = \mathcal{F}^{(\sigma)}(\Sigma, X, Q, \sigma) = a_1 \Sigma^2 + a_2 \Sigma X + a_3 \Sigma Q + a_4 X Q + a_5 Q^2 + bc\sigma, \\ \frac{d^2 \chi}{dx^2} = \mathcal{F}^{(\chi)}(\Sigma, X, Q, \sigma, X, \rho) = -X^2 + b_1 \Sigma^2 + b_2 \Sigma X + b_3 \Sigma Q + b_4 X Q + \\ \qquad \qquad \qquad + b_5 Q^2 + \frac{\beta}{1 + \sigma}(e^{\chi} - \rho) + nc\sigma, \end{array} \right. \quad (6)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \chi = \sigma = 0 \text{ при } x = 0, 1, \\ \varphi = 0 \text{ при } x = 0, \\ \varphi = B \text{ при } x = 1, \end{array} \right. \quad (7)$$

$$\begin{aligned} u &= F(E) \{ Q - (1 + \sigma) X - F_0(E) \Sigma \}, \\ q &= G(E) \{ -Q + (1 + \sigma) X + G_0(E) \Sigma \}. \end{aligned} \quad (8)$$

$$\begin{aligned} \text{Здесь } \beta &= \frac{1}{\varepsilon}, \quad \chi = \ln R, \quad \Sigma = \frac{d\sigma}{dx}, \quad X = \frac{d\chi}{dx}, \quad a_1 = -a'F(E)F_0(E) + b'G(E)G_0(E), \\ a_2 &= -1 + (1 + \sigma)\{b'G(E) - a'F(E)\}, \quad a_3 = a'F(E) - b'G(E) - bF(E)F_0(E), \\ a_4 &= -b(1 + \sigma)F(E), \quad a_5 = bF(E), \quad b_1 = -m'F(E)F_0(E) + n'G(E)G_0(E), \\ b_2 &= (1 + \sigma)\{n'G(E) - m'F(E)\}, \quad b_3 = -\frac{1}{(1 + \sigma)^2} + m'F(E) - n'G(E) - nF(E)F_0(E), \\ b_4 &= \frac{1}{1 + \sigma} + bF(E)F_0(E), \quad b_5 = nF(E), \quad a = a(E) = \frac{2}{5} \frac{c_{21}}{1 + \sigma} - c_{11}, \\ b &= b(E) = \frac{2}{5} \frac{c_{22}}{1 + \sigma} - c_{12}, \quad m = m(E) = \frac{c_{11} - a}{1 + \sigma}, \quad n = n(E) = \frac{c_{12} - b}{1 + \sigma}, \quad F(E) = -\frac{c_{22} - \frac{5}{3}Ec_{12}}{\det}, \\ G(E) &= -\frac{c_{21} - \frac{5}{3}Ec_{11}}{\det}, \quad F_0(E) = 1 - \frac{\frac{5}{3}Ec_{12}}{c_{22} - \frac{5}{3}Ec_{12}}, \quad G_0(E) = 1 - \frac{\frac{5}{3}Ec_{11}}{c_{21} - \frac{5}{3}Ec_{11}}, \end{aligned}$$

$$\det = c_{11}c_{22} - c_{21}c_{12}, \quad a' = \frac{da}{d\sigma} = \frac{3}{2} \frac{da}{dE} \text{ и т.д.}$$

Для поиска стационарных решений задачи (1) – (5) необходимо осуществить:

1. Задание начальных данных:

$$\varphi, E, \sigma = \frac{2}{3}E - 1.$$

2. Расчет необходимых коэффициентов:

$$\begin{aligned} c, c_{11}, c_{12}, c_{21}, c_{22}, \quad K(x) &= \int_0^x \rho c \sigma d\tau, \quad a_{11}(x) = \int_0^x \frac{c_{11} + c_{12}\varphi}{\rho} d\tau, \quad a_{12}(x) = \int_0^x \frac{c_{12}}{\rho} d\tau, \\ a_{21}(x) &= \int_0^x \frac{c_{21} + c_{22}\varphi}{\rho(1 + \sigma)} d\tau, \quad a_{22}(x) = \int_0^x \frac{c_{22}}{\rho(1 + \sigma)} d\tau, \quad d_1(x) = \int_0^x \left\{ (1 + \sigma) \frac{\rho'}{\rho} - \frac{c_{12}}{\rho} K \right\} d\tau, \\ d_2(x) &= \int_0^x \left\{ \frac{5}{2} (1 + \sigma) \frac{\rho'}{\rho} - \frac{c_{22}}{\rho(1 + \sigma)} K \right\} d\tau, \quad \det = a_{11}(1)a_{22}(1) - a_{12}(1)a_{21}(1). \end{aligned}$$

3. Вычисление промежуточных величин:

$$\begin{aligned} J &= \frac{1}{\det} \left\{ a_{22}(1)(d_1(1) - B) - a_{12}(1) \left( d_2(1) - \frac{5}{2}B \right) \right\}, \\ I_0 &= \frac{1}{\det} \left\{ -a_{21}(1)(d_1(1) - B) + a_{11}(1) \left( d_2(1) - \frac{5}{2}B \right) \right\}. \end{aligned}$$

4. Пересчет  $\varphi, \sigma$ :

$$\omega(x) = d_1(x) - a_{11}(x)J - a_{12}(x)I_0,$$

$$\sigma(x) = \omega(x) - \frac{2}{5}d_2(x) + \frac{2}{5}a_{21}(x)J + \frac{2}{5}a_{22}(x)I_0, \quad \varphi(x) = \omega(x) + \sigma(x),$$

$$E(x) = \frac{3(\sigma(x) + 1)}{2}.$$

В цикле организуется вычисление шагов 2–4. Цикл прекращает работу в тот момент, когда значения неизвестных найдены с заданной точностью.

Поиск приближенного решения задачи (6)–(7) осуществлялся с помощью метода установления [5]. Для этого рассматривали параболическую, гиперболическую и Соболевскую регуляризацию [6,7]. Было проведено огромное число экспериментов, которые показали, что скорость сходимости метода зависит от выбора регуляризации. Поскольку Соболевская регуляризация дает самую высокую скорость сходимости, то для построения численных алгоритмов используем следующую систему:

$$\begin{cases} (1 - \xi^2)\tau\varphi = \xi^2\varphi - \mathcal{F}^{(\varphi)}(\chi, \rho), \\ (1 - \xi^2)\tau\sigma = \xi^2\sigma - \mathcal{F}^{(\sigma)}(\xi\sigma, \xi\chi, \xi\varphi, \sigma), \\ (1 - \xi^2)\tau\chi = \xi^2\chi - \mathcal{F}^{(\chi)}(\xi\sigma, \xi\chi, \xi\varphi, \sigma, \chi, \rho), \end{cases} \quad (9)$$

$$\tau = \frac{\partial}{\partial t}, \quad \xi = \frac{\partial}{\partial x}, \quad t - \text{переменная по времени.}$$

Начальные данные для систем уравнений (7), (9) при  $t > 0$  и  $0 < x < 1$  примут следующий вид:

$$\begin{cases} \varphi(0, x) = \varphi_0(x), \\ \sigma(0, x) = \sigma_0(x) = \frac{2}{3}E_0(x) - 1, \\ \chi(0, x) = \chi_0(x) = \ln R_0(x). \end{cases} \quad (10)$$

Далее для поиска численного решения задачи (7), (9) – (10) были сконструированы алгоритмы. В этих алгоритмах использовались кубические сплайны класса  $C^2$  [8], интегральные уравнения и схема предиктор – корректор. Разработанные алгоритмы будем описывать на модельной задаче.

Система уравнений (9) состоит из трех одинаковых уравнений, которые отличаются друг от друга только правыми частями. Поэтому далее рассматриваем только одно из трех уравнений:

$$\begin{cases} (1 - \xi^2)\tau y = \xi^2 y - f^{(y)}, \quad t > 0, \quad 0 < x < 1; \\ y = 0 \text{ при } x = 0, 1, \quad t > 0; \\ y = y_0(x) \text{ при } t = 0, \quad 0 < x < 1. \end{cases} \quad (11)$$

При подстановке функций  $\mathcal{F}^{(\varphi)}$ ,  $\mathcal{F}^{(\sigma)}$ ,  $\mathcal{F}^{(\chi)}$  в правую часть  $f^{(y)}$ , а при подстановке  $\varphi$ ,  $\sigma$ ,  $\chi$  в функцию  $y$ , будет получена исходная система (9).

Также нам понадобится и другая запись полученной задачи (11), которая нужна для сведения этой задачи к интегральным уравнениям:

$$\begin{cases} \tau\theta_y + \theta_y = \tilde{f}^{(y)}, & t > 0, \quad 0 < x < 1; \\ \theta_y = \theta_{y_0}(x) = y_0(x) - \xi^2 y_0(x) & \text{при } t = 0, \quad 0 < x < 1, \end{cases} \quad (12)$$

$$\theta_y = \theta_y(t, x) = y(t, x) - \xi^2 y(t, x), \quad \tilde{f}^{(y)} = \tilde{f}^{(y)}(t, x) = y(t, x) - \tilde{f}^{(y)}(t, x).$$

Далее в уравнении  $(1 - \xi^2)\tau y = \xi^2 y - f^{(y)}$  системы (11) провели дискретизацию по переменной  $t$ . Производную  $\tau y$  аппроксимировали выражением  $\frac{Y - y}{\Delta}$ :

$$\xi^2 Y = \mathfrak{B}Y + \mathfrak{F}, \quad \mathfrak{B} = \frac{1}{1 + \Delta}, \quad \mathfrak{F} = \frac{\xi^2 y - y + \Delta f^{(y)}}{1 + \Delta}, \quad (13)$$

$\Delta$  является шагом разностной сетки по времени  $t$ ,  $y^n(x) = y(n\Delta, x) = y$ ,  $n = 0, 1, \dots$ ,  $Y = y^{n+1}(x)$ .

Приближённое решение задачи (11) искали в виде кубического интерполяционного сплайна класса  $C^2$  (см. [8]):

$$\mathbf{S}(x) = (1 - \bar{\tau})Y_k + \bar{\tau}Y_{k+1} - \frac{h^2}{6}\bar{\tau}(1 - \bar{\tau})[(2 - \bar{\tau})m_k + (1 + \bar{\tau})m_{k+1}], \quad (14)$$

$$\bar{\tau} = \frac{x - x_k}{h}, \quad x \in [x_k, x_{k+1}], \quad k = \overline{0, N-1}, \quad x_k = k \cdot h, \quad N \cdot h = 1, \quad Y_k = Y(x_k),$$

$$m_k = \xi^2 Y(x_k).$$

$$\text{Поскольку } \xi \mathbf{S}(x) = \frac{Y_{k+1} - Y_k}{h} - \frac{h}{6}[(2 - 6\bar{\tau} + 3\bar{\tau}^2)m_k + (1 - 3\bar{\tau}^2)m_{k+1}], \quad x \in [x_k, x_{k+1}],$$

$$k = \overline{0, N-1}, \quad \text{то вычисляя } \xi \mathbf{S}(x_k + 0) = \frac{Y_{k+1} - Y_k}{h} - \frac{h}{6}[2m_k + m_{k+1}],$$

$$\xi \mathbf{S}(x_k - 0) = \frac{Y_k - Y_{k-1}}{h} - \frac{h}{6}[m_{k-1} + 2m_k] \text{ и приравнявая их, получили}$$

$$\frac{1}{2}m_{k-1} + 2m_k + \frac{1}{2}m_{k+1} = \frac{3}{h^2}(\eta Y_k - \bar{\eta} Y_k), \quad k = \overline{1, N-1}, \quad (15)$$

$\eta = \psi - 1$ ,  $\bar{\eta} = 1 - \psi^{-1}$ ,  $\psi^{\pm 1} Y_k = Y_{k \pm 1}$  ( $\psi^{\pm 1} = \psi$ ) являются разностными операторами и операторами сдвига, соответственно.

Полагая в (13)  $x = x_k$  и подставляя  $\xi^2 Y_k$  в (15), переходим к следующей разностной схеме, которая является трехслойной:

$$\begin{aligned} \left\{1 - \frac{h^2}{6}\mathfrak{B}\right\}Y_{k-1} - 2\left\{1 + \frac{h^2}{3}\mathfrak{B}\right\}Y_k + \left\{1 - \frac{h^2}{6}\mathfrak{B}\right\}Y_{k+1} = \\ = \frac{h^2}{6}\{\mathfrak{F}_{k-1} + 4\mathfrak{F}_k + \mathfrak{F}_{k+1}\}, \quad k = \overline{1, N-1}, \quad \mathfrak{F}_k = \mathfrak{F}(x_k). \end{aligned} \quad (16)$$

Для (16) задаем краевые условия:

$$Y_0 = 0, \quad Y_N = 0. \quad (17)$$

Решая трехдиагональную систему уравнений (16) – (17) с помощью метода прогонки [5], находим функции  $Y_k$ ,  $k = \overline{0, N}$ .

Для вычисления производной  $\xi y$  также использовались кубические сплайны (14). Из  $\xi \mathbf{S}(x) = \frac{Y_{k+1} - Y_k}{h} - \frac{h}{6} \left[ (2 - 6\bar{\tau} + 3\bar{\tau}^2)m_k + (1 - 3\bar{\tau}^2)m_{k+1} \right]$ ,  $x \in [x_k, x_{k+1}]$ ,  $k = \overline{0, N-1}$ , следует:

$$\begin{aligned} \xi \mathbf{S}(x_{k+1}) &= \frac{Y_{k+1} - Y_k}{h} - \frac{h}{6} [m_k + 2m_{k+1}], \quad x \in [x_k, x_{k+1}], \quad k = \overline{0, N-1}, \\ \xi \mathbf{S}(0) &= \frac{Y_1 - Y_0}{h} + \frac{h}{6} [2m_0 + m_1]. \end{aligned}$$

Другой вычислительный алгоритм основывается на сведение модельной задачи (12) к системе интегральных уравнений. Решая дифференциальное уравнение (12), получили:

$$\theta_y(t, x) = e^{-t} \theta_{y_0}(x) + \int_0^t e^{-(t-\zeta)} \left[ y(\zeta, x) - f^{(y)}(\zeta, x) \right] d\zeta, \quad (18)$$

где  $\theta_{y_0}(x) = y_0(x) - \xi^2 y_0(x)$ .

Добавляя к выражению  $\theta_y(t, x) = y(t, x) - \xi^2 y(t, x)$  условие  $y = 0$  ( $x = 0, x = 1, t > 0$ ), пришли к задаче, зависящей от параметра  $t$ :

$$\begin{cases} \xi^2 y(t, x) - y(t, x) = -\theta_y(t, x), \\ y(t, 0) = y(t, 1) = 0. \end{cases} \quad (19)$$

Решение, которой представлено в виде интегрального уравнения (20):

$$y(t, x) = - \int_0^1 G(x, s) \theta_y(t, s) ds, \quad (20)$$

$$G(x, s) = \begin{cases} \frac{\text{sh } s \text{ sh}(x-1)}{\text{sh } 1}, & 0 < s \leq x, \\ \frac{\text{sh } x \text{ sh}(s-1)}{\text{sh } 1}, & x < s \leq 1. \end{cases}$$

$$\xi y(t, x) = - \int_0^x \text{ch}(x-s) \theta_\varphi(t, s) ds - \frac{\text{ch } x}{\text{sh } 1} \int_0^1 \text{ch}(s-1) \theta_\varphi(t, s) ds. \quad (21)$$

Проведя дискретизацию по переменной  $t$  в (18), (20), (21) и считая, что  $(\theta_y)_i^n = \theta_y(n\Delta, x_i)$ ,  $y_i^n = y(n\Delta, x_i)$ , получили систему:

$$\left\{ \begin{aligned} y_i^n &= -\int_0^1 G(x_i, s) \theta_y((n-1)\Delta, s) ds, \\ \xi y(n\Delta, x_i) &= -\int_0^{x_i} ch(x_i - s) \theta_\varphi((n-1)\Delta, s) ds - \frac{chx_i}{sh1} \int_0^1 ch(s-1) \theta_\varphi((n-1)\Delta, s) ds, \\ (\theta_y)_i^n &= e^{-n\Delta} \left( \theta(0, x_i) + \int_0^{n\Delta} e^\zeta [y(\zeta, x_i) - f^{(y)}(\zeta, x_i)] d\zeta \right), \\ \theta_y(0, x) &= y_0(x) - \xi^2 y_0(x), \quad n = 1, 2, \dots \end{aligned} \right. \quad (22)$$

Расчет интегралов в (22) осуществлялся с помощью метода трапеции [9] с переменным шагом  $h_i = x_{i+1} - x_i$ ,  $i = 0, N-1$  на сетке по  $x$ .

Переходим к рассмотрению последнего вычислительного алгоритма, который связан с использованием схемы предиктор–корректор. Для этого, в уравнении (12) и интегральных соотношениях провели дискретизацию по переменной  $t$ . В результате уравнение (12) записалось так:

$$\frac{\theta_y^* - \theta_y^n}{\Delta/2} + \theta_y^* = (\tilde{f}^{(y)})^n, \quad \frac{\theta_y^{n+1} - \theta_y^n}{\Delta} + \theta_y^{n+1} = (\tilde{f}^{(y)})^*.$$

Из полученных уравнений выражаем  $\theta_y^*$ ,  $\theta_y^{n+1}$ :

$$\theta_y^* = \frac{\theta_y^n + \frac{\Delta}{2} (\tilde{f}^{(y)})^n}{1 + \frac{\Delta}{2}}, \quad \theta_y^{n+1} = \frac{\Delta (\tilde{f}^{(y)})^* + \theta_y^n}{1 + \Delta}.$$

Используя интегральные уравнения (20) – (21), удалось перейти к следующей системе последовательных выражений:

$$\left\{ \begin{aligned} (\tilde{f}^{(y)})_i^n &= y_i^n - \tilde{f}^{(y)}(n\Delta, x_i), \quad (\theta_y^*)_i = \frac{(\theta_y)_i^n + \frac{\Delta}{2} (\tilde{f}^{(y)})_i^n}{1 + \frac{\Delta}{2}}, \\ y_i^* &= -\int_0^1 G(x_i, s) \theta_y^*(s) ds, \\ (\tilde{f}^{(y)})_i^* &= y_i^* - \tilde{f}^{(y)}(n\Delta, x_i), \quad (\theta_y)_i^{n+1} = \frac{\Delta (\tilde{f}^{(y)})_i^* + (\theta_y)_i^n}{1 + \Delta}, \\ y_i^{n+1} &= -\int_0^1 G(x_i, s) \theta_y((n+1)\Delta, s) ds, \\ \xi y((n+1)\Delta, x_i) &= -\int_0^{x_i} ch(x_i - s) \theta_\varphi((n+1)\Delta, s) ds - \\ &\quad - \frac{chx_i}{sh1} \int_0^1 ch(s-1) \theta_\varphi((n+1)\Delta, s) ds. \end{aligned} \right. \quad (23)$$

Расчет интегралов в (23) осуществлялся с помощью метода трапеции или метода Симпсона [9].

Таким образом, чтобы найти решение на следующем временном слое, необходимо задать начальные данные для  $E$ ,  $R$ ,  $\varphi$ , и последовательно осуществить действия:

1. Рассчитать правую часть  $\mathcal{F}^{(\varphi)}(\chi(n\Delta, x), \rho)$  для первого уравнения в (9), где значение  $\chi$  берется с  $n$ -го (предыдущего) слоя. Найти решение для электрического потенциала  $\varphi^{n+1} = \varphi((n+1)\Delta, x)$  и вычислить производную  $\xi\varphi^{n+1}$ .

2. Рассчитать правую часть для второго уравнения в (9)  $\mathcal{F}^{(\sigma)}(\xi\sigma(n\Delta, x), \xi\chi(n\Delta, x), \xi\varphi((n+1)\Delta, x) + B, \sigma^n)$ , где  $\sigma$ ,  $\chi$  берутся с  $n$ -го слоя, а  $\varphi$  – с  $(n+1)$ -го слоя. Найти решение  $\sigma^{n+1} = \sigma((n+1)\Delta, x)$  и вычислить производную  $\xi\sigma^{n+1}$ .

3. Рассчитать правую часть для третьего уравнения в (9)  $\mathcal{F}^{(\chi)}(\xi\sigma((n+1)\Delta, x), \xi\chi(n\Delta, x), \xi\varphi((n+1)\Delta, x) + B, \sigma^{n+1}, \chi^n, \rho)$ , где значение  $\chi$  берется с  $n$ -го слоя, а  $\varphi$ ,  $\sigma$  – с  $(n+1)$ -го слоя. Найти решение  $\chi^{n+1} = \chi((n+1)\Delta, x)$  и вычислить производную  $\xi\chi^{n+1}$ .

Данные действия осуществляется в цикле. Цикл прекращает свою работу в тот момент, когда численное решение найдено с заданной точностью.

Для реализации и тестирования описанных вычислительных схем, разработана система «Численный анализ задачи о баллистическом диоде». Меню системы представлено на рисунке 2.

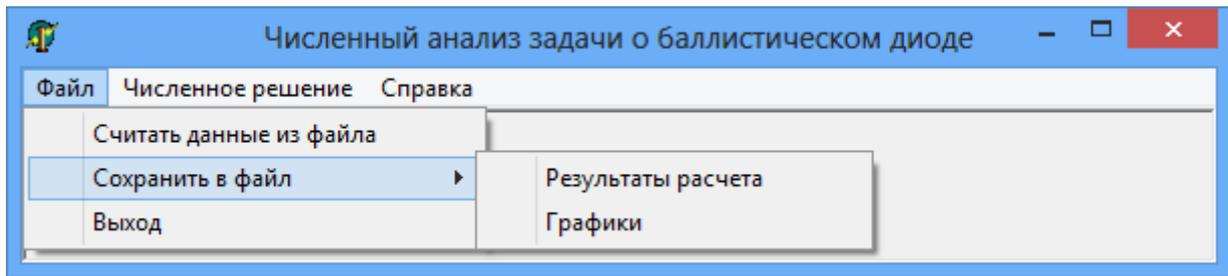


Рисунок 2 – Меню системы

В окне «Численное решение задачи о баллистическом диоде» (рисунок 3) необходимо задать физические и численные параметры, утвердить начальные данные или считать данные из файла, указать количество итераций, выбрать алгоритм решения задачи. Только после этого можно будет получить решение задачи и сохранить в файл. Более того, в системе возможно следить за поведением графика зависимости энергии от времени.

Расчеты показали, что разработанные вычислительные алгоритмы имеют разные скорости сходимости. Алгоритм, использующий кубические сплайны, имеет более высокую скорость, чем алгоритм, использующий схему предиктор-корректор.

Хорошие результаты при  $\sigma = 0.004$  можно получить с помощью системы интегральных уравнений (рисунок 4). При небольших  $\sigma$  лучше использовать другие алгоритмы.

Проверку правильности работы разработанных алгоритмов осуществили с помощью метода ортогональной прогонки. Данный метод позволяет проводить расчеты с заданной точностью. На рисунке 5 представлены результаты метода ортогональной прогонки и разработанных алгоритмов. Из рисунка видно, что результаты практически совпадают, т.е. графики, построенные для плотности, потенциала и энергии электронов разными алгоритмами совпали. Есть небольшие расхождения только для скорости электронов.

Численное решение задачи о баллистическом диоде

**Физические параметры**

Длина канала  $L = 6 \cdot 10^{-7}$  м  $d = 1/6$

Плотность легирования  $n^+$  области  $N = 5 \cdot 10^{17}$  см<sup>-3</sup>

Плотность легирования  $n$  области  $N = 2 \cdot 10^{15}$  см<sup>-3</sup>

$\beta = 10749,32277$   $\delta = 0,0040$

Напряжение смещения  $V = 1$

---

**Численные параметры**

Количество узлов сетки по  $x$   $N = 100$

Шаг разностной сетки по  $x$   $h_x = 0,0100$

Шаг разностной сетки по  $t$   $\Delta t = 0,1$

Количество итераций по нелинейности  $M = 10$

Точность  $EPS = 10^{-8}$

$\Delta l = 1/12 = 0,004$

---

**Начальные данные**

Эл. потенциал  $\varphi = 0$  Энергия электронов  $E = 1,5$

Электронная плотность  $R = 1$

Потоки  $I = 0$   $J = 0$

Безразмерное  $V = 38,6473$

Утвердить начальные данные

**Схематическое представление баллистического диода**

Количество итераций

**Сохранение графиков**

<input type="checkbox"/> Потенциал	<input type="checkbox"/> Энергия E	<input type="checkbox"/> Электронная плотность R
<input type="checkbox"/> I	<input type="checkbox"/> J	<input type="checkbox"/> Скорректированное u

**Алгоритмы решения:**

1. Интегральные уравнения    2. Модификация интегральных уравнений

3. Схемы предиктор-корректор

4. Техника сайай-функций    5. Приближенная математическая модель

---

**График зависимости энергии E от t**

Рисунок 3 – Окно «Численное решение задачи о баллистическом диоде»

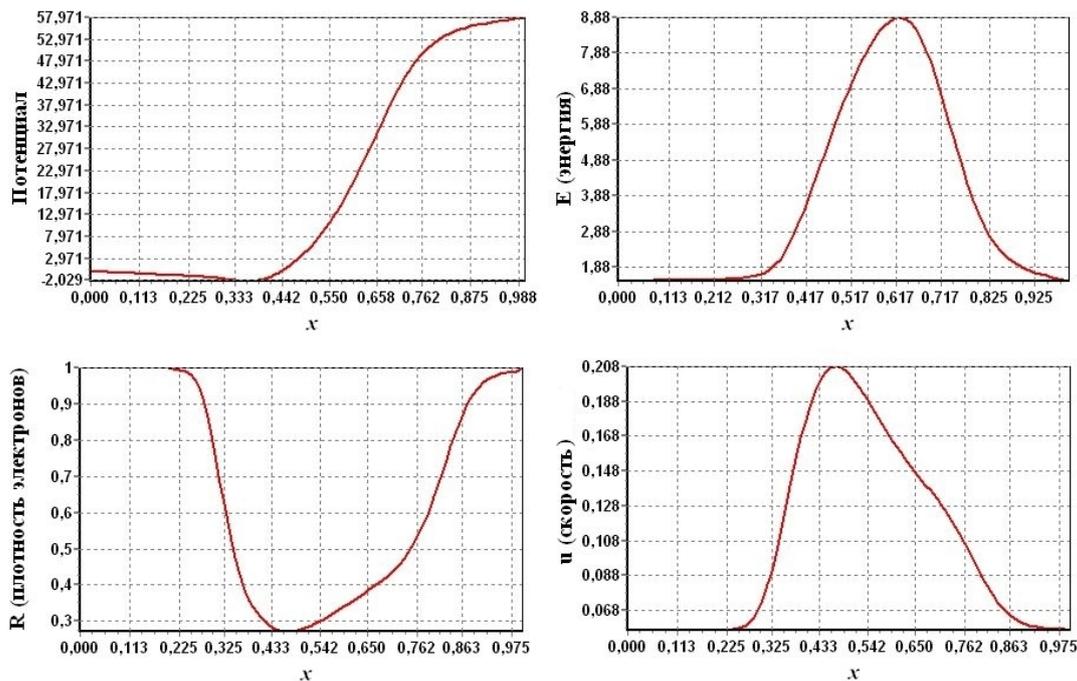


Рисунок 4 –  $V = 1.5 \text{ Volt}$ ,  $\sigma = 0.004$ ,  $L = 3 \times 10^{-7} \text{ m}$ ,  $N = 100$ ,  $\Delta_1 = \frac{1}{12}$ ,  $\varepsilon_1 = 10^{-6}$

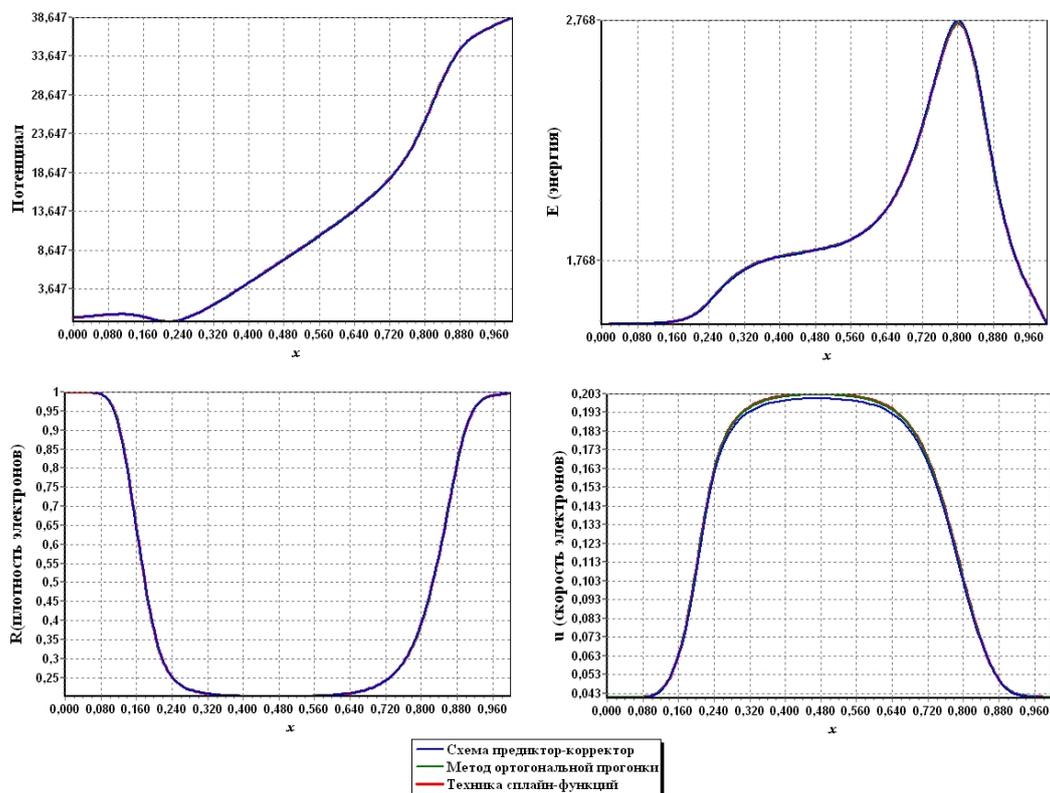


Рисунок 5 – Расчеты четырех методов:

$$V = 1 \text{ Volt}, \sigma = 0.2, L = 6 \times 10^{-7} \text{ m}, N = 200, \Delta_1 = \frac{1}{12}, \varepsilon_1 = 10^{-6}$$

### Заключение и выводы

С помощью разработанной системы осуществлено огромное число расчетов при разных параметрах. Расчеты показали, что разработанные вычислительные алгоритмы дают физически правдоподобные результаты, которые совпадают с результатами других авторов. Материалы данной работы могут быть интересны специалистам, занимающихся моделированием различных физических процессов в полупроводниковых приборах.

### Литература

1. Muscato, O. Simulation of submicron silicon diode with a non-parabolic hydrodynamical model based on the maximum entropy principle / Muscato O. Romano // VLSI Design. – 2001. – V.13. – P. 273–279.
2. Blokhin, A. M. Nonlinear asymptotic stability of the equilibrium state for the MEP model of charge transport in semiconductors / A. M. Blokhin, R. S. Bushmanov, V. Romano // Nonlinear Analysis. – 2006. – V. 65. – P. 2169–2191.
3. Blokhin, A. M. Numerical method for 2D Simulation of a Silicon MESFET with a Hydrodynamical Model Based on the Maximum Entropy Principle / A. M. Blokhin, A. S. Ibragimova // SIAM Journal on Scientific Computing. – 2009. – V. 31. – Issue 3. – P. 2015–2046.
4. Blokhin, A. M. 1D Numerical Simulation of the MEP Mathematical Model in ballistic diode problem / A. M. Blokhin, A. S. Ibragimova // Journal of Kinetic and Related Models. – 2009. – V. 2. – № 1. – P. 81–107.
5. Бабенко, К. И. Основы численного анализа / К. И. Бабенко. – Москва–Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», – 2002. – 848 с. – Текст : непосредственный.
6. Блохин, А. М. Численный анализ задач переноса заряда в полупроводниковых устройствах / А. М. Блохин, А. С. Ибрагимова, Б. В. Семисалов. – Saarbrücken, Germany: Palmarium Academic Publishing, 2012. – 209 с. – Текст : непосредственный.
7. Шевченко, А. С. Алгоритм поиска приближенных решений уравнения Пуассона / А. С. Шевченко. – Текст : непосредственный // Молодой ученый, 2015. – № 3. – С. 18–23.
8. Завьялов, Ю. С. Методы сплайн-функций / Ю. С. Завьялов, Б. И. Квасов, В. Л. Мирошниченко; под ред. Н. Н. Яненко. – М. : Наука, 1980. – 352 с. – Текст : непосредственный.
9. Шевченко, А. С. Численные методы : учеб. пособие / А. С. Шевченко. – М. : ИНФРА-М, 2022. – 381 с. – Текст : непосредственный.