

Estudiaremos métodos de diferencias finitas y de elementos finitos para resolver problemas de contorno de ecuaciones diferenciales ordinarias.

Consideremos una placa semiconductora de grosor l (en la dirección del eje x) cuyas dimensiones horizontales son mucho más grandes que l y pueden suponerse infinitas, dopada con impurezas eléctricamente activas $C(x) = C_D^+(x) - C_A^-(x)$, donde C_A^- , C_D^+ con las concentraciones de impurezas acceptoras y dadoras, respectivamente, que son uniformes en las direcciones horizontales (y y z). Apliquemos a este semiconductor una diferencia de potencial $U(x)$ con $U(0) = U_0$ y $U(l) = 0$. Por simetría, podemos considerar el semiconductor como unidimensional.

Sean $n(x)$ y $p(x)$ las concentraciones de electrones y huecos bajo un campo potencial interno $\psi(x)$. Bajo condiciones de equilibrio podemos aplicar la distribución estadística clásica (no cuántica) de Boltzmann

$$n(x) = n_i \exp\left(\frac{q}{\theta}(\psi(x) - \varphi_F)\right), \quad p(x) = n_i \exp\left(-\frac{q}{\theta}(\psi(x) - \varphi_F)\right),$$

donde n_i es la concentración intrínseca de electrones, q es la carga de un electrón, $\theta = kT$ es la temperatura estadística, k es la constante de Boltzmann, T es la temperatura absoluta, y φ_F es el potencial de Fermi que es constante en todo el semiconductor y se toma como nivel de referencia ($\varphi_F = 0$).

Bajo estas condiciones, podemos aplicar la ecuación de Poisson al potencial interno $\psi(x)$ dando lugar a

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{q}{\epsilon}(n(x) - p(x) - C(x)),$$

donde ϵ es la constante dieléctrica del sustrato (normalmente silicio). Normalmente la concentración se representa mediante un potencial $\psi_D(x)$ usando la definición

$$C(x) = n_i \left(\exp\left(\frac{q}{\theta}\psi_D(x)\right) - \exp\left(-\frac{q}{\theta}\psi_D(x)\right) \right).$$

Tomaremos condiciones de contorno de tipo Dirichlet

$$\psi(0) = \psi_D(0) + U_0, \quad \psi(l) = \psi_D(l).$$

Para simplificar el análisis del problema vamos a adimensionalizarlo

$$x = \lambda_D X, \quad \lambda_D = \sqrt{\frac{\epsilon\theta}{q^2 n_i}},$$

$$\varphi(X) = \frac{q}{\theta} \psi(x), \quad \varphi_D(X) = \frac{q}{\theta} \psi_D(x), \quad u_0 = \frac{q}{\theta} U_0, \quad c(X) = \frac{C(x)}{n_i},$$

donde λ_D es la longitud de Debye. De esta forma

$$\varphi_D(x) = \operatorname{argsinh} \frac{c(X)}{2} = \ln \left(\frac{1}{2} \left(\sqrt{c(X)^2 + 4} + c(X) \right) \right),$$

y la ecuación de Poisson y sus condiciones de contorno se transforman en

$$\frac{d^2 \varphi(X)}{dX^2} = e^{\varphi(X)} - e^{-\varphi(X)} - c(X), \quad (1)$$

$$\varphi(0) = \varphi_D(0) + u_0, \quad \varphi(L) = \varphi_D(L), \quad L = \frac{l}{\lambda_D}. \quad (2)$$

1. Considere un mallado no uniforme del intervalo $[0, L]$ con $N+1$ puntos, tal que $0 = X_0 < X_1 < \dots < X_N = L$, donde $h_i = X_{i+1} - X_i$. Tomando $\varphi_{Di} = \varphi_D(X_i)$ y $c_i = c(X_i)$, calcule $\varphi_i \approx \varphi(X_i)$ mediante un método en diferencias finitas de segundo orden en una malla no uniforme. (a) Escriba la ecuación en diferencias (con condiciones de contorno) que obtiene. (b) Escriba las ecuaciones no lineales que ha obtenido en la forma $A\varphi = F(\varphi)$. (c) Resuelva dicho sistema de ecuaciones no lineales mediante el método de Newton. (d) Escriba el sistema de ecuaciones lineales que ha obtenido mediante Newton.
2. (a) Escriba un programa Matlab que resuelva la ecuación (1)-(2) mediante diferencias finitas para una malla cualquiera. Consideremos una unión PN con

$$L = 10, \quad c(X) = \tanh \left(20 \left(\frac{X}{L} - \frac{1}{2} \right) \right).$$

NOTA: calcule $\varphi_D(X)$ y considere u_0 como dato de entrada.

- (b) Considere una malla uniforme $h_i = h$. Represente gráficamente el potencial φ_D y la solución φ para $u_0 = 0$ y $u_0 = 0,3$. ¿Qué diferencias

observas entre estos potenciales en ambos casos? Puedes justificar el porqué.

(c) Calcule la solución para una malla uniforme suficientemente fina ($N = 300$ puntos), la consideraremos solución exacta. Compare el error para el mismo número de puntos ($N = 10 : 5 : 50$) entre una malla uniforme $h=[0:L/(N-1):L]$, una generada aleatoriamente usando

```
h = sort( [ 0, rand(1,N-2)*L, L]),
```

y una generada mediante

```
h = interp1(c(X),X,[-1:2/(N-1):1]); h(0)=0; h(1)=L;
```

donde se ha calculado la inversa de $c(X)$ por interpolación. Presente una gráfica con los errores para los tres casos. ¿Cuál es más precisa en general?

3. Con el mallado no uniforme del problema 1, calcule $\varphi_i \approx \varphi(X_i)$ mediante un método de elementos finitos de segundo orden (basado en polinomios lineales a trozos continuos). (a) Escriba la formulaciones de Galerkin y variacional continua de la ecuación (1). (b) Escriba la formulación variacional discreta de la ecuación (1). (c) Determine la ecuación no lineal que ha de resolver para obtener los coeficientes del polinomio lineal a trozos continuo de la solución. (d) Resuelva dicho sistema de ecuaciones no lineales mediante el método de Newton. (d) Escriba el sistema de ecuaciones lineales que ha obtenido mediante Newton.
4. Repita todos los apartados del problema 2 pero con el método de elementos finitos que acaba de desarrollar.
5. Compare los dos métodos numéricos que ha desarrollado: diferencias finitas y elementos finitos. ¿Cuál es más preciso? ¿Cuál es más fácil de codificar? Razone sus respuestas en función de las gráficas que ha obtenido.