

Les variables fondamentales ψ , n et p sont positionnées aux nœuds principaux indiqués par l'indice h . Les variables dérivées J_n , J_p et ξ sont définies aux nœuds secondaires situés au milieu des tranches, et indiqués par l'indice η . La discrétisation spatiale peut être uniforme comme elle peut être non uniforme. Vu la structure étudiée, il est plus convenable d'appliquer une discrétisation non uniforme, et qui soit plus fine au niveau de l'interface n/p afin de montrer, plus clairement, les variations des différentes variables au niveau de l'interface.

La méthode des différences finies permet d'exprimer les dérivées aux nœuds secondaires η de la manière suivante :

$$\frac{dn}{dx}(\eta) = \frac{n(h) - n(h-1)}{\delta x(h)} \quad \frac{dp}{dx}(\eta) = \frac{p(h) - p(h-1)}{\delta x(h)} \quad \frac{d\psi}{dx}(\eta) = \frac{\psi(h) - \psi(h-1)}{\delta x(h)}$$

$$\frac{dJ_n}{dx}(h) = \frac{J_n(\eta+1) - J_n(\eta)}{\delta z(\eta)} \quad \frac{dJ_p}{dx}(h) = \frac{J_p(\eta+1) - J_p(\eta)}{\delta z(\eta)} \quad \xi(\eta) = -\frac{d\psi}{dx}(\eta) = \frac{\psi(h-1) - \psi(h)}{\delta x(h)}$$

$$\Delta\psi(h) = \frac{\xi(\eta) - \xi(\eta+1)}{\delta z(\eta)}$$

Equations discrétisées:

L'équation de Poisson est discrétisée aux nœuds principaux en utilisant la méthode des différences finies. On suppose que le potentiel ψ est linéaire entre deux points successifs. La discrétisation de l'équation de Poisson au nœud h donne :

$$\gamma_1(h)\psi(h-1) + \gamma_2(h)\psi(h) + \gamma_3(h)\psi(h+1) = -\frac{\rho(h)}{\varepsilon_r \varepsilon_0}$$

avec :

$$\gamma_1(h) = \frac{1}{\delta x(h)\delta z(\eta)} \quad \gamma_2(h) = -\frac{1}{\delta z(\eta)} \left(\frac{1}{\delta x(h)} + \frac{1}{\delta x(h+1)} \right) \quad \gamma_3(h) = \frac{1}{\delta x(h+1)\delta z(\eta)}$$

$$\rho(h) = q(p(h) - n(h) + p_t(h) - n_t(h) + N_{AD}(h)), \quad h = 2:H_t$$

On définit la fonction $F^\psi(h)$:

$$F^\psi(h) = \gamma_1(h)\psi(h-1) + \gamma_2(h)\psi(h) + \gamma_3(h)\psi(h+1) + \frac{\rho(h)}{\varepsilon_r \varepsilon_0} = 0$$

Notons que $h=1$ et $h=H_t+1$ sont réservés aux conditions aux limites.

Les équations de continuité, discrétisées au point h s'écrivent :

$$\frac{1}{q} \left(\frac{J_n(\eta+1) - J_n(\eta)}{\delta z(\eta)} \right) = -G(h) + U_R(h)$$

$$\frac{1}{q} \left(\frac{J_p(\eta+1) - J_p(\eta)}{\delta z(\eta)} \right) = G(h) - U_R(h)$$

avec

$$J_n(\eta+1) = \frac{q\mu_n}{\theta} \frac{dn}{dx}(\eta+1) - q\mu_n \frac{d\psi}{dx}(\eta+1) \cdot n(\eta+1)$$

$$J_p(\eta+1) = -\frac{q\mu_p}{\theta} \frac{dp}{dx}(\eta+1) - q\mu_p \frac{d\psi}{dx}(\eta+1) \cdot p(\eta+1)$$

$$\text{où } \theta = \frac{q}{k_B T}.$$

Si on remplace J_n et J_p dans les équations de continuité par leurs dernières expressions, on pourra avoir des instabilités numériques lorsque le potentiel entre deux points successifs est supérieur au voltage thermique V_T ($V_T = k_B T / q$). Pour résoudre ce problème, une approximation dite approximation de Gummel est utilisée: on suppose que le champ électrique ξ et les densités de courant J_n et J_p sont constants entre deux points successifs, h et $h+1$:

Dans ces équations, le taux de génération optique G est indépendant des variables n , p et ψ .

Le taux de recombinaison, U_R , dépend seulement de n et p . Ces deux quantités s'écrivent sous la forme discrétisée comme suit :

$$G(h) = \alpha \phi_o \exp(-\alpha x(h))$$

$$U_R(h) = \sum_{k=1}^{k=N} R_{srh}(h, k)$$

$$R_{srh}(h, k) = \frac{n(h).p(h) - n_i^2}{\tau_{srh,n}(k) \left(p + n_i e^{\frac{E_i - E_T(k)}{k_B T}} \right) + \tau_{srh,p}(k) \left(n + n_i e^{\frac{E_T(k) - E_i}{k_B T}} \right)}$$

$$\tau_{srh,n}(k) = \frac{1}{\sigma_n(k) \vartheta_{th} N_T(k)}, \tau_{srh,p}(k) = \frac{1}{\sigma_p(k) \vartheta_{th} N_T(k)}$$

Le taux de recombinaison total $U_R(h)$ dépend du nombre des niveaux d'énergie des défauts existant dans le gap d'énergie du semi-conducteur, si on a (N) nombre de niveaux d'énergie $E_T(k)$, $k = 1:N$ pour les défauts, le taux de recombinaison total est la somme de tous les taux de recombinaison $R_{srh}(h, k)$ se produisant aux niveaux $E_T(k)$. $\tau_{srh,n}(k)$, $\tau_{srh,p}(k)$, $\sigma_n(k)$, $\sigma_p(k)$ sont respectivement les durées de vie des électrons et des trous dépendant du niveau d'énergie $E_T(k)$ et de sa densité des états $N_T(k)$. $\sigma_n(k)$, $\sigma_p(k)$ les sections efficaces de capture des électrons et des trous au niveau $E_T(k)$. ϑ_{th} la vitesse thermique.

Le système complet des équations à résoudre est formé des trois d'équations, couplées, non linéaires, F^ψ , F^n et F^p écrites à chaque point (h) du dispositif

$$F^\psi(h) = \gamma_1(h)\psi(h-1) + \gamma_2(h)\psi(h) + \gamma_3(h)\psi(h+1) + \frac{\rho(h)}{\epsilon_r \epsilon_0} = 0$$

$$F^n(h) = \frac{1}{\delta z(\eta)} \left(-\frac{\lambda_{n1}(\eta)}{\delta x(h)} n(h-1) + \left(\frac{\lambda_{n1}(\eta+1)}{\delta x(h+1)} - \frac{\lambda_{n2}(\eta)}{\delta x(h)} \right) n(h) + \frac{\lambda_{n2}(\eta+1)}{\delta x(h+1)} n(h+1) \right) + G(h) - U_R(h) = 0$$

$$F^p(h) = \frac{1}{\delta z(\eta)} \left(-\frac{\lambda_{p1}(\eta)}{\delta x(h)} p(h-1) + \left(\frac{\lambda_{p1}(\eta+1)}{\delta x(h+1)} - \frac{\lambda_{p2}(\eta)}{\delta x(h)} \right) p(h) + \frac{\lambda_{p2}(\eta+1)}{\delta x(h+1)} p(h+1) \right) - G(h) + U_R(h) = 0$$

Au total, le système comprend $3 \times (H_t - 1)$ équations ($h = 2 : H_t$) à $3 \times (H_t - 1)$ inconnus à déterminer ; $\psi(h)$, $n(h)$ et $p(h)$ à chaque point (h) ($h = 2 : H_t$).

On réécrit le système sous la forme vectorielle :

$$\begin{pmatrix} F(2) \\ F(3) \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ F(h) \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ F(H_t) \end{pmatrix} \quad \text{ou, où } F(h) = \begin{pmatrix} F^\psi(h) \\ F^n(h) \\ F^p(h) \end{pmatrix}$$

et tout les $F(h)$ dépendent des variables $\psi(j)$, $n(j)$ et $p(j)$, où $j = h-1, h, h+1$.

Généralement, on utilise des méthodes itératives pour résoudre un système d'équations non linéaires. Il y a deux approches différentes qu'on peut les utiliser :

méthode de Gummel , méthode de Newton

1. Méthode de Gummel

La méthode de Gummel est une méthode découplée qui résout, pour chaque étape d'itération s , l'équation de Poisson et les équations de continuité séparément.

L'ensemble des équations de Poisson, F^ψ , est résolu pour le potentiel ψ en considérant n et p fixes. On utilise pour n et p les valeurs, n^s et p^s obtenues de l'itération précédente, s , pour résoudre le système des équations F^ψ et trouver ψ^{s+1} pour l'itération $s+1$:

$$n^s(h), p^s(h) \Rightarrow \psi^{s+1}(h).$$

L'ensemble des équations de continuité des électrons, F^n , est résolu pour la densité des électrons n en considérant p et ψ fixes. On utilise ψ^{s+1} , déterminé de l'équations de Poisson à l'itération $s+1$, et p^s de l'itération s pour trouver n^{s+1} :

$$\psi^{s+1}(h), p^s(h) \Rightarrow n^{s+1}(h).$$

Pour l'ensemble des équations de continuité des trous, F^p , on détermine p^{s+1} à l'itération $s+1$ en utilisant ψ^{s+1} et n^{s+1} :

$$\psi^{s+1}(h), n^{s+1}(h) \Rightarrow p^{s+1}(h).$$

A chaque étape d'itération, l'équation de Poisson est résolue à chaque nœud h ($h = 2 : H_t$). On aura donc $H_t - 1$ équations à résoudre. De même pour les équations de continuité des électrons et des trous.

2. Méthode de Newton

C'est une méthode couplée qui résout, simultanément, l'ensemble des $3 \times (H_t - 1)$ équations. Dans chaque étape d'itération $s+1$, le système d'équations F^ψ , F^n et F^p sont résolus simultanément pour ψ , n et p en utilisant ceux de l'itération précédente s :

$\psi^s(h)$, $n^s(h)$ et $p^s(h) \Rightarrow \psi^{s+1}(h)$, $n^{s+1}(h)$ et $p^{s+1}(h)$. L'avantage de la méthode de Gummel réside dans le fait que son programme est relativement simple. Les équations sont résolues séparément et on n'a pas besoin de faire une normalisation sur les grandeurs. Son inconvénient c'est qu'elle prend beaucoup de temps à cause du nombre des itérations. La méthode de Newton est beaucoup plus rapide car elle nécessite moins d'itérations. Seulement les variables n et p ont des grandeurs très élevées par rapport au potentiel ψ . Retrouver, simultanément, les trois solutions ψ , n et p nécessite d'introduire une normalisation sur les grandeurs. Pour la résolution numérique, on utilise la méthode de Newton.

La méthode de Newton peut être utilisée pour résoudre l'équation $f(x)=0$ où la fonction f est supposée avoir une dérivée continue, f' . La méthode itérative utilise ainsi la solution y tel que :

$$y^{s+1} = y^s - \frac{f(y^s)}{f'(y^s)}$$

pour s'approcher de la solution exacte pour laquelle $f(x)=0$. Ici, s indique

l'étape de l'itération.

$$f'(y^s) = \frac{\partial f}{\partial y} = \frac{f(y^{s+1}) - f(y^s)}{y^{s+1} - y^s}, \text{ la solution doit vérifier } f(y^{s+1}) = 0 \text{ ce qui donne } y^{s+1} = y^s - \frac{f(y^s)}{f'(y^s)}$$

Le système est linéarisé par un développement de Taylor, du premier ordre, appliqué aux différentes quantités non linéaires figurant dans les équations à résoudre, et dépendant des variables ψ , n et p

$$f(y^{s+1}) = f^0(y^s) + \frac{\partial f}{\partial y} \delta y$$

$$\text{D'autre part la solution doit vérifier } f(y^{s+1}) = 0, \Rightarrow f^0(y^s) + \frac{\partial f}{\partial y} \delta y = 0$$

Pour l'équation de Poisson : $F^\psi(h) = f(\psi(h-1), \psi(h), \psi(h+1), n(h), p(h))$

$$\begin{aligned} \Rightarrow F^\psi(h) &= F^{0\psi}(h) + \frac{\partial F^\psi}{\partial \psi(h-1)} \delta \psi(h-1) + \frac{\partial F^\psi}{\partial \psi(h)} \delta \psi(h) + \frac{\partial F^\psi}{\partial \psi(h+1)} \delta \psi(h+1) \\ &\quad + \frac{\partial F^\psi}{\partial n(h)} \delta n(h) + \frac{\partial F^\psi}{\partial p(h)} \delta p(h) = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow &\frac{\partial F^\psi}{\partial \psi(h-1)} \delta \psi(h-1) + \frac{\partial F^\psi}{\partial \psi(h)} \delta \psi(h) + \frac{\partial F^\psi}{\partial \psi(h+1)} \delta \psi(h+1) + \frac{\partial F^\psi}{\partial n(h)} \delta n(h) + \frac{\partial F^\psi}{\partial p(h)} \delta p(h) \\ &= -F^{0\psi}(h) \end{aligned}$$

ce qui donne finalement :