Gummel 迭代的数值格式离散化

许笑颜

1 Possion 方程

原方程：

$$-\frac{\varepsilon}{q}\Delta\psi + n - p + C = 0$$

第一次离散后：

$$-\frac{\varepsilon}{q}\cdot\frac{\psi_{i-1}+\psi_{i+1}-2\psi_i}{h_i^2} + n_i - p_i + C = 0 \tag{1}$$

写成矩阵形式的离散格式：

$$-\frac{\varepsilon}{q\cdot h_i^2}\begin{bmatrix} -2 & 0 & & & & & \\ 1 & -2 & 1 & & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & & \\ & & & & & & \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & & & & \\ & & & & 1 & -2 & 1 \\ & & & & & 0 & -2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \psi_0 \\ \psi_1 \\ \\ \vdots \\ \\ \vdots \\ \psi_{n-1} \\ \psi_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -n_0+p_0-C \\ -n_1+p_1-C \\ \\ \vdots \\ \\ \vdots \\ -n_{n-1}+p_{n-1}-C \\ -n_n+p_n-C \end{bmatrix} \tag{2}$$

参考论文 [1]，假设静电势的左边界条件为 $\psi_0 = \psi_{left}$，右边界条件为 $\psi_n = \psi_{right}$，则方程 (2) 重写为以下形式；

$$-\frac{\varepsilon}{q\cdot h_i^2}\begin{bmatrix} -2 & 0 & & & & & \\ 1 & -2 & 1 & & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & & \\ & & & & & & \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & & & & \\ & & & & 1 & -2 & 1 \\ & & & & & 0 & -2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \psi_0 \\ \psi_1 \\ \\ \vdots \\ \\ \vdots \\ \psi_{n-1} \\ \psi_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{2\varepsilon}{q\cdot h_i^2}\psi_{left} \\ -n_1+p_1-C \\ \\ \vdots \\ \\ \vdots \\ -n_{n-1}+p_{n-1}-C \\ \frac{2\varepsilon}{q\cdot h_i^2}\psi_{right} \end{bmatrix} \tag{3}$$

2 电子电流连续性方程

原方程：

$$-\nabla\cdot J_n+R\left(x\right)=0$$

使用论文 [2]Scharfetter-Gummel 数值离散格式，将电子电流密度 J_n 离散为以下格式：

$$J_{n+\frac{1}{2}}=\frac{1}{h_i}\left[B\left(\psi_{i+1}-\psi_i\right)n_{i+1}-B\left(\psi_i-\psi_{i+1}\right)n_i\right],\tag{4}$$

$$J_{n-\frac{1}{2}}=\frac{1}{h_i}\left[B\left(\psi_i-\psi_{i-1}\right)n_i-B\left(\psi_{i-1}-\psi_i\right)n_{i-1}\right].\tag{5}$$

其中 $B(x)=\frac{x}{e^x-1}$ 是 Bernoulli 函数。

方程的数值离散格式为

$$-\frac{J_{n+\frac{1}{2}}-J_{n-\frac{1}{2}}}{h_i}+R\left(x\right)=0,\tag{6}$$

将 (4),(5) 代入以上数值离散格式：

$$\frac{1}{h_i^2}\left[-B\left(\psi_{i+1}-\psi_i\right)n_{i+1}+B\left(\psi_i-\psi_{i+1}\right)n_i+B\left(\psi_i-\psi_{i-1}\right)n_i-B\left(\psi_{i-1}-\psi_i\right)n_{i-1}\right]+R\left(x\right)=0.\tag{7}$$

参照论文 ([1])，电子载流子浓度 n 的左边界条件为 $n(0)=N_c exp(-\frac{E_{gap}-\phi_a}{V_t})$，右边界条件为 $n(L)=N_c exp(-\frac{\phi_c}{V_t})$。

写成矩阵形式如下：

$$\frac{1}{h_i^2}\begin{bmatrix} 1 & 0 & & & & \\ -B\left(\psi_0-\psi_1\right) & B\left(\psi_1-\psi_2\right)+B\left(\psi_1-\psi_0\right) & -B\left(\psi_2-\psi_1\right) & & & \\ & -B\left(\psi_1-\psi_2\right) & \ddots & \ddots & & \\ & & \ddots & & & \\ & & & & & B\left(\psi_n-\psi_{n-1}\right) \\ & & & & 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} n_0 \\ n_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ n_{n-1} \\ n_n \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 1/h_i^2\cdot n\left(0\right) \\ -R\left(x\right) \\ \vdots \\ \vdots \\ -R\left(x\right) \\ 1/h_i^2\cdot n\left(L\right) \end{bmatrix}\tag{8}$$

3 空穴电流连续性方程

原方程：

$$\nabla\cdot J_p+R\left(x\right)=0.$$

使用论文 [3]Scharfetter-Gummel 数值离散格式，将电子电流密度 J_p 离散为以下格式：

$$J_{p,i+\frac{1}{2}}=-\frac{1}{h_i}\left[B\left(\psi_{i+1}-\psi_i\right)p_i-B\left(\psi_i-\psi_{i+1}\right)p_{i+1}\right],\tag{9}$$

$$J_{n,i-\frac{1}{2}}=-\frac{1}{h_i}\left[B\left(\psi_i-\psi_{i-1}\right)p_{i-1}-B\left(\psi_{i-1}-\psi_i\right)p_i\right].\tag{10}$$

方程的数值离散格式为

$$\frac{J_{p+\frac{1}{2}}-J_{p-\frac{1}{2}}}{h_i}+R\left(x\right)=0.\tag{11}$$

将 (10),(9) 代入以上数值离散格式：

$$\frac{1}{h_i^2}\left[-B\left(\psi_{i+1}-\psi_i\right)p_i+B\left(\psi_i-\psi_{i+1}\right)p_{i+1}+B\left(\psi_i-\psi_{i-1}\right)p_{i-1}-B\left(\psi_{i-1}-\psi_i\right)p_i\right]+R\left(x\right)=0, \tag{12}$$

参考论文 ([1])，空穴载流子浓度 p 的左边界条件为 $p(0)=N_c exp(-\frac{\phi_a}{V_t})$，右边界条件为 $p(L)=N_c exp(-\frac{E_{gap}-\phi_c}{V_t})$。

写成矩阵形式如下：

$$\frac{1}{h_i^2}\begin{bmatrix} 1 & 0 & & & \\ B\left(\psi_1-\psi_0\right) & -B\left(\psi_2-\psi_1\right)-B\left(\psi_0-\psi_1\right) & B\left(\psi_1-\psi_2\right) & & \\ & B\left(\psi_2-\psi_1\right) & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & & \\ & & & & B\left(\psi_{n-1}-\psi_n\right) \\ & & & 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} p_0 \\ p_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ p_{n-1} \\ p_n \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 1/h_i^2\cdot p\left(0\right) \\ -R\left(x\right) \\ \vdots \\ \vdots \\ -R\left(x\right) \\ 1/h_i^2\cdot p\left(L\right) \end{bmatrix} \tag{13}$$

参考文献

[1] Golubev T, Liu D, Lunt R, et al. Understanding the impact of C60 at the interface of perovskite solar cells via drift-diffusion modeling[J]. AIP Advances, 2019, 9(3).

[2] Ringhofer C, Schmeiser C. An approximate Newton method for the solution of the basic semiconductor device equations[J]. SIAM journal on numerical analysis, 1989, 26(3): 507-516.

[3] Farrell P A, Gartland Jr E C. On the Scharfetter-Gummel discretization for drift-diffusion continuity equations[J]. Computational methods for boundary and interior layers in several dimensions, 1991: 51-79.