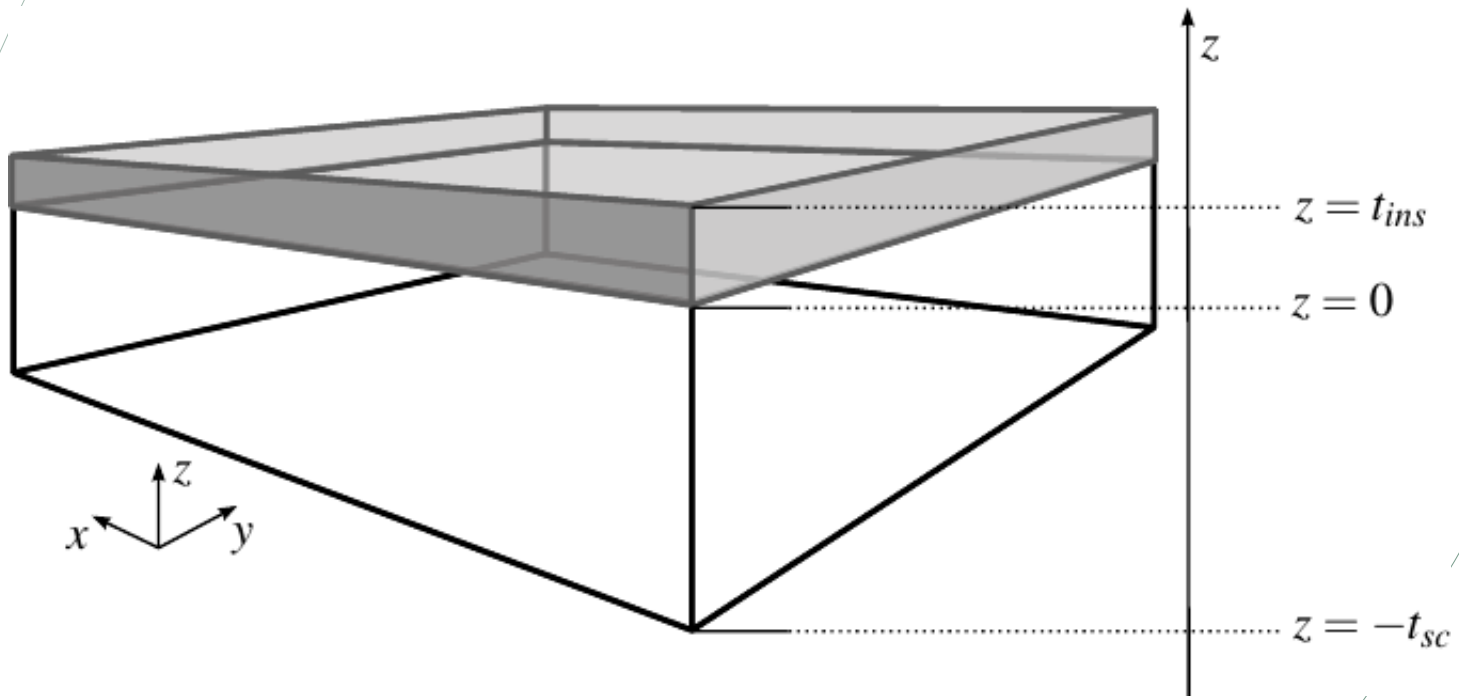
Estrazione della Densità degli Stati in semiconduttori organici

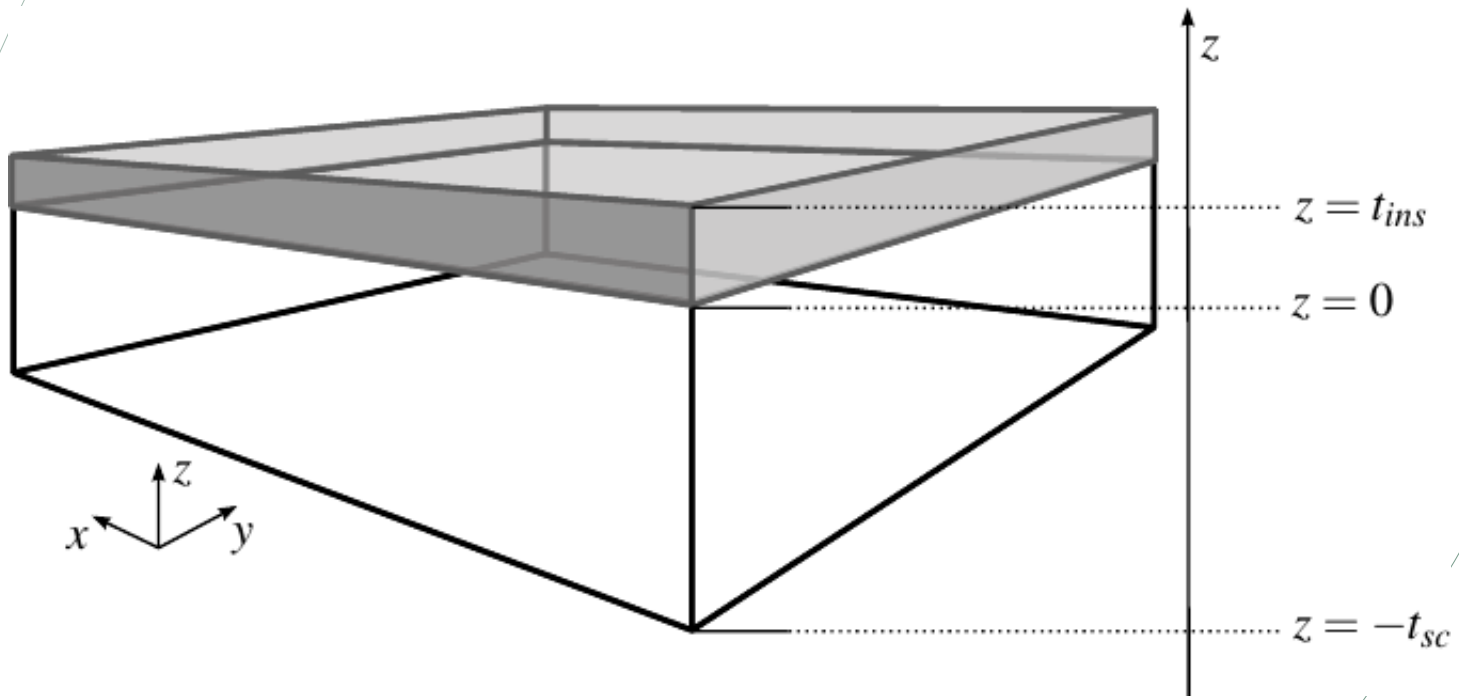
Pasquale Africa

19 novembre 2014

Condensatore **MIS** (Metal - Insulator - Semiconductor)



Condensatore **MIS** (Metal - Insulator - Semiconductor)



Semiconduttore a base organica:

- basso costo
- possibilità di ottenere dispositivi flessibili (display, smart-card etc.)
- prestazioni paragonabili

Sistema drift-diffusion:

$$\begin{cases} -\nabla \cdot (\epsilon \nabla \varphi) = \rho & \text{in } \Omega \\ q\dfrac{\partial n}{\partial t} - q\nabla \cdot (D_n \nabla n - n\mu_n \nabla \varphi) + qR = qG & \text{in } \Omega_{semic} \\ q\dfrac{\partial p}{\partial t} - q\nabla \cdot (D_p \nabla p + p\mu_p \nabla \varphi) + qR = qG & \text{in } \Omega_{semic} \end{cases}$$

dove:

- φ è potenziale elettrico $[V]$;
- n è la concentrazione volumetrica di elettroni $\left[m^{-3}\right]$;
- p è la concentrazione volumetrica di lacune $\left[m^{-3}\right]$.

Sistema drift-diffusion:

$$\begin{cases} -\nabla \cdot (\epsilon \nabla \varphi) = \rho & \text{in } \Omega \\ q\dfrac{\partial n}{\partial t} - q\nabla \cdot (D_n \nabla n - n\mu_n \nabla \varphi) + qR = qG & \text{in } \Omega_{semic} \\ q\dfrac{\partial p}{\partial t} - q\nabla \cdot (D_p \nabla p + p\mu_p \nabla \varphi) + qR = qG & \text{in } \Omega_{semic} \end{cases}$$

dove:

- φ è potenziale elettrico $[V]$;
- n è la concentrazione volumetrica di elettroni $\left[m^{-3}\right]$;
- p è la concentrazione volumetrica di lacune $\left[m^{-3}\right]$.

Extended Gaussian Disorder Model:

$$\begin{aligned} \mu_n(T, \nabla\varphi, n) &= \mu_0(T) \cdot g_1(\nabla\varphi) \cdot g_2(n) \\ D_n &= g_3 V_{th} \mu_n \end{aligned}, \qquad \boxed{g_1, g_2 \propto \text{DOS}}$$

Sommario

- Problema di **identificazione dei parametri**
  - disordine molecolare σ, λ
- estensione di un codice `Octave`

Sommario

- Problema di **identificazione dei parametri**
  - disordine molecolare σ, λ
- estensione di un codice `Octave`
- equazione di Poisson integro-differenziale non lineare
  - relazioni costitutive per la Density of States

Sommario

- Problema di **identificazione dei parametri**
  - disordine molecolare σ, λ
- estensione di un codice `Octave`
- equazione di Poisson integro-differenziale non lineare
  - relazioni costitutive per la Density of States

1. Modello matematico
2. Metodi numerici: linearizzazione, discretizzazione etc.
3. Implementazione della libreria
4. Risultati e conclusioni

Dalle equazioni di Maxwell:

$$\nabla \cdot \vec{D} = \rho$$

$$\nabla \times \vec{E} + \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = \vec{0}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$$

$$\nabla \times \mathbf{H} - \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} = \vec{J}$$

Dalle equazioni di Maxwell:

$$\nabla \cdot \vec{D} = \rho$$
$$\nabla \times \vec{E} + \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = \vec{0}$$
$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$$
$$\nabla \times \mathbf{H} - \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} = \vec{J}$$

$$\Longrightarrow \qquad \boxed{-\nabla \cdot (\epsilon \nabla \varphi) = \rho}$$

dove:

- φ è potenziale elettrico $[V]$;
- ϵ è la permittività elettrica del mezzo $\left[C \cdot V^{-1} \cdot m^{-1}\right]$;
- ρ è la densità di carica $\left[C \cdot m^{-3}\right]$;

Equazione di Poisson

$$\epsilon = \begin{cases} \epsilon_{semic} & \text{nel semiconduttore} \\ \epsilon_{ins} & \text{nell'isolante} \end{cases}$$

$\longrightarrow$ l'equazione vale in senso debole

$$\epsilon = \begin{cases} \epsilon_{semic} & \text{nel semiconduttore} \\ \epsilon_{ins} & \text{nell'isolante} \end{cases}$$

$\longrightarrow$ l'equazione vale in senso debole

$$\rho = \begin{cases} -q\left(n - p + N_A - N_D\right) & \text{nel semiconduttore} \\ 0 & \text{nell'isolante.} \end{cases}$$

dove:

- n, p concentrazioni di elettroni e lacune $\left[m^{-3}\right]$;
- N_A, N_D drogaggio (assunto nullo nel caso organico) $\left[m^{-3}\right]$.

$$f_D(\mathcal{E}) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{\mathcal{E} - \mathcal{E}_F}{k_B \cdot T}\right)}$$

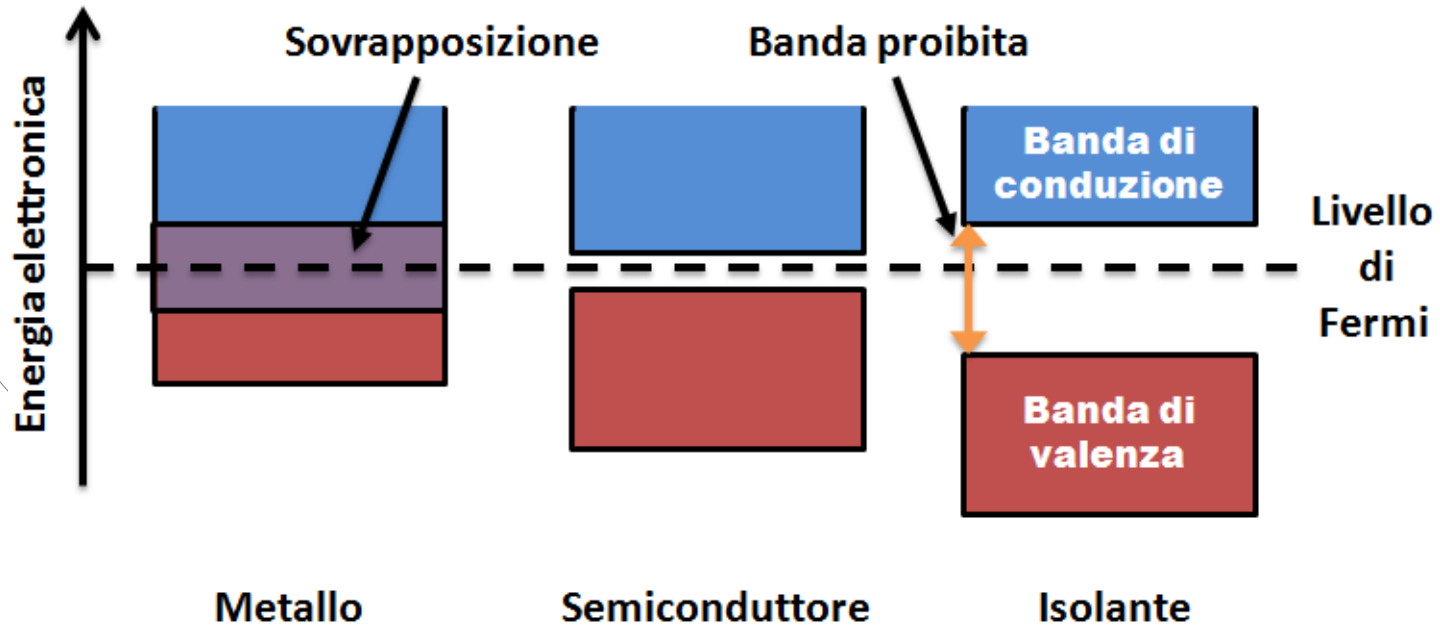
$f_D \approx$ numero di elettroni aventi energia $\mathcal{E}$ (Pauli)

- k_B costante di Boltzmann $\left[J \cdot K^{-1}\right]$, T temperatura $[K]$;

$$f_D(\mathcal{E}) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{\mathcal{E}-\mathcal{E}_F}{k_B \cdot T}\right)}$$

$f_D \approx$ numero di elettroni aventi energia $\mathcal{E}$ (Pauli)

- k_B costante di Boltzmann $\left[J \cdot K^{-1}\right]$, T temperatura $[K]$;
- $\mathcal{E}_F$ livello di Fermi $[J]$: livello occupato di maggior energia in un sistema di fermioni alla temperatura di $0K$.



Valgono:

$$n = \int_{-\infty}^{+\infty} g\left(\mathcal{E} - \mathcal{E}_{LUMO}\right) \cdot f_D\left(\mathcal{E} - \mathcal{E}_F\right) \, \mathrm{d}\mathcal{E}$$

$$p = \int_{-\infty}^{+\infty} g\left(\mathcal{E}_{HOMO} - \mathcal{E}\right) \cdot \left[1 - f_D\left(\mathcal{E} - \mathcal{E}_F\right)\right] \, \mathrm{d}\mathcal{E}$$

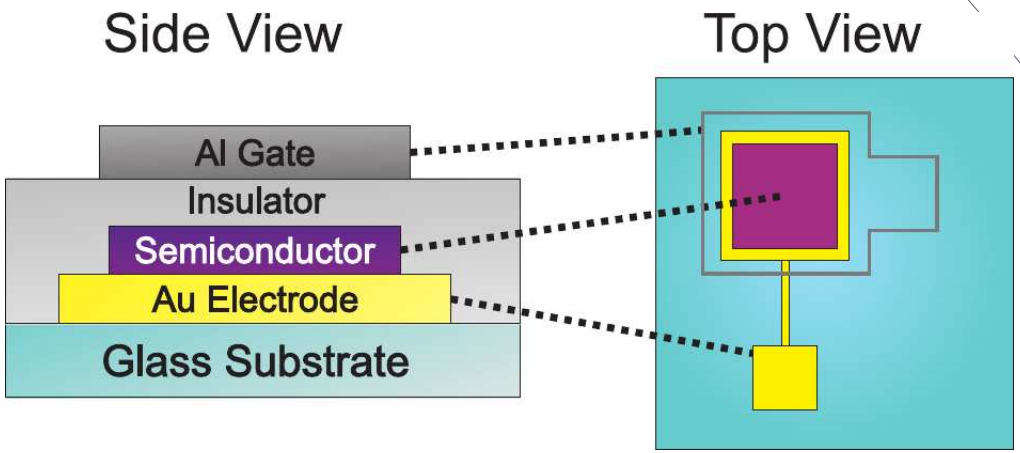
dove l'integrale è esteso ai livelli di energia ammissibili e:

- $g \equiv$ DOS;
- $\mathcal{E}_{HOMO}$ energia Highest Occupied Molecular Orbital;
- $\mathcal{E}_{LUMO}$ energia Lowest Unoccupied Molecular Orbital:

$$\varphi = -\frac{\mathcal{E}_{LUMO}}{q} \quad \text{in } \Omega_{semic}.$$

- Approssimazione 1D:

  $x \gg z$



- effetti termici trascurabili (solo disordine)
- regime quasi-statico:

  - equilibrio ($\Rightarrow \mathcal{E}_F$ costante, assunto 0)

  - no trasporto
- semiconduttore intrinseco:

  $\rho = -q(n - p)$
- solo una specie di portatori (elettroni):

  $\rho = -qn$

Relazioni costitutive

- Gaussiana (singola o multipla)

- Esponenziale

- Gaussiana (singola o multipla) :

$$g_\sigma(\cdot) = \frac{N_0}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(\cdot)^2}{2\sigma^2}}$$

- Esponenziale :

$$g_\lambda(\cdot) = \frac{N_0}{\lambda} \exp\left(-\frac{(\cdot)}{\lambda}\right)$$

- Gaussiana (singola o multipla) :

$$g_\sigma(\cdot) = \frac{N_0}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(\cdot)^2}{2\sigma^2}}$$

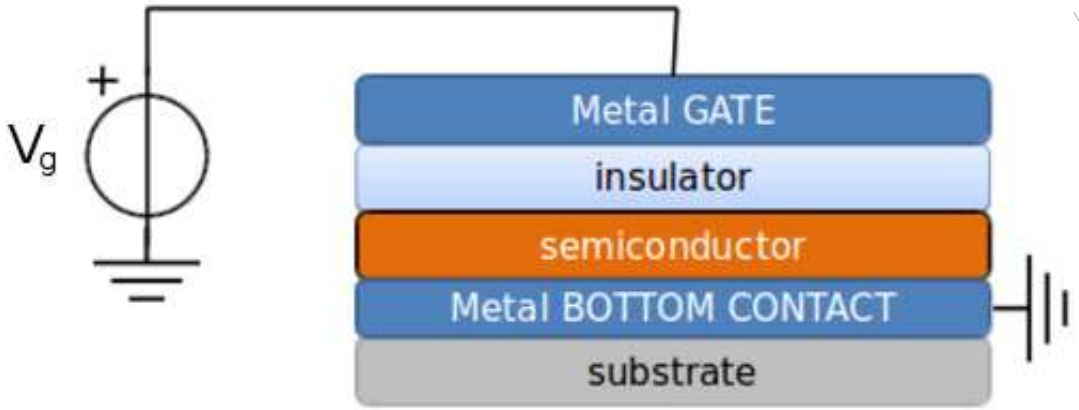
$$n(\varphi) = \frac{N_0}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha^2} \left(1 + \exp\left(\frac{\sqrt{2}\sigma\alpha - q\varphi}{k_B \cdot T}\right)\right)^{-1} \mathrm{d}\alpha$$

- Esponenziale :

$$g_\lambda(\cdot) = \frac{N_0}{\lambda} \exp\left(-\frac{(\cdot)}{\lambda}\right)$$

$$n(\varphi) = \frac{N_0}{\lambda} \int_{0}^{+\infty} e^{-\alpha} \left(1 + \exp\left(\frac{\lambda\alpha - q\varphi}{k_B \cdot T}\right)\right)^{-1} \mathrm{d}\alpha$$

Condizioni al contorno



Il potenziale φ è fissato ai contatti elettrici $\longrightarrow$ condizioni di Dirichlet.

- Gate (tensione esterna):

$$\varphi = V_g + V_{shift} \quad \text{su } \Gamma_{ins}$$

- Back (barriera di **Schottky**):

$$\varphi = \phi_F - \phi_B = -\phi_B \quad \text{su } \Gamma_{semic}$$

$$\Omega_{semic} = (t_{semic}, 0]$$
$$\Omega_{ins} = (0, t_{ins})$$

$$\begin{cases} -\left(\epsilon\varphi'\right)'(z) = -\frac{N_0 q}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-\alpha^2}}{\left(1+\exp\left(\frac{\sqrt{2}\sigma\alpha - q\varphi(z)}{k_B \cdot T}\right)\right)} \,\mathrm{d}\alpha & z \in \Omega_{semic} \\ -\left(\epsilon\varphi'\right)'(z) = 0 & z \in \Omega_{ins} \\ \varphi(-t_{semic}) = -\phi_B & \\ \varphi(t_{ins}) = V_g + V_{shift}\ . & \end{cases}$$

$\longrightarrow$ equazione di Poisson **integro-differenziale non lineare**.

$$\Omega_{semic} = (t_{semic}, 0]$$
$$\Omega_{ins} = (0, t_{ins})$$

$$\begin{cases} -\left(\epsilon\varphi'\right)'(z) = -\frac{N_0 q}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-\alpha^2}}{\left(1+\exp\left(\frac{\sqrt{2}\sigma\alpha - q\varphi(z)}{k_B \cdot T}\right)\right)} \, \mathrm{d}\alpha & z \in \Omega_{semic} \\ -\left(\epsilon\varphi'\right)'(z) = 0 & z \in \Omega_{ins} \\ \varphi(-t_{semic}) = -\phi_B & \\ \varphi(t_{ins}) = V_g + V_{shift} \, . & \end{cases}$$

$\longrightarrow$ equazione di Poisson **integro-differenziale non lineare**.

Dovrà essere:

1. linearizzata;
2. discretizzata.

L'equazione si può scrivere:

$$\mathcal{F}(\varphi) = 0$$

dove $\mathcal{F}$ è un funzionale integro-differenziale non lineare.

$\longrightarrow$ **Metodo di Newton**

L'equazione si può scrivere:

$$\mathcal{F}(\varphi) = 0$$

dove $\mathcal{F}$ è un funzionale integro-differenziale non lineare.

$\longrightarrow$ **Metodo di Newton** :

occorre risolvere

$$\begin{cases} \mathcal{DF}\left(\varphi^{(k)}\right)\left[\delta\varphi^{(k)}\right] = -\mathcal{F}\left(\varphi^{(k)}\right) \\ \varphi^{(k+1)} = \varphi^{(k)} + \delta\varphi^{(k)} \end{cases}$$

fino a convergenza.

$\mathcal{DF}(\cdot)$ è la derivata secondo **Gâteaux** di $\mathcal{F}$.

$$\mathcal{D}\mathcal{F}(\varphi)[\chi] = \lim_{\kappa \to 0} \frac{\mathcal{F}(\varphi + \kappa\chi) - \mathcal{F}(\varphi)}{\kappa} =$$

$$\mathcal{D}\mathcal{F}(\varphi)[\chi] = \lim_{\kappa\to 0} \frac{\mathcal{F}(\varphi+\kappa\chi) - \mathcal{F}(\varphi)}{\kappa} =$$

$$= \lim_{\kappa\to 0} \frac{1}{\kappa}\left[-\cancel{\left(\epsilon\varphi'\right)'} + \kappa\epsilon\chi')' + \cancel{\left(\epsilon\varphi'\right)'}\right] +$$

$$+ \lim_{\kappa\to 0} \frac{1}{\kappa}\frac{N_0 q}{\sqrt{2\pi}\sigma}\int_{-\infty}^{+\infty}\left[\exp\left(-\frac{(\mathcal{E}+q(\varphi+\kappa\chi))^2}{2\sigma^2}\right) + \right.$$

$$\left. - \exp\left(-\frac{(\mathcal{E}+q\varphi)^2}{2\sigma^2}\right)\right]\cdot\frac{1}{1+\exp\left(\frac{\mathcal{E}}{k_B\cdot T}\right)}\,\mathrm{d}\mathcal{E} =$$

(effettuando uno sviluppo di Taylor per $\kappa \sim 0$):

$$= -\left(\epsilon\chi'\right)' - \frac{N_0 q^2\chi}{\sqrt{2\pi}\sigma}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left(-\frac{(\mathcal{E}+q\varphi)^2}{2\sigma^2}\right)\frac{\mathcal{E}+q\varphi}{2\sigma^2}\frac{1}{1+\exp\left(\frac{\mathcal{E}}{k_B\cdot T}\right)}\,\mathrm{d}\mathcal{E}$$

Il sistema diventa:

$$\begin{cases} -\left(\epsilon\left(\delta\varphi^{(k)}\right)'\right) - \dfrac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}\varphi}\left(\varphi^{(k)}\right)\cdot\delta\varphi^{(k)} = \left(\epsilon\left(\varphi^{(k)}\right)'\right)' + \rho\left(\varphi^{(k)}\right) \\ \varphi^{(k+1)} = \varphi^{(k)} + \delta\varphi^{(k)} \\ \delta\varphi^{(k)}(-t_{semic}) = 0 \\ \delta\varphi^{(k)}(t_{ins}) = 0\,. \end{cases}$$

per ogni iterazione k fino a convergenza, valutata sulla norma L^∞ dell'incremento.

Il sistema diventa:

$$\begin{cases} -\left(\epsilon\left(\delta\varphi^{(k)}\right)'\right) - \dfrac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}\varphi}\left(\varphi^{(k)}\right)\cdot\delta\varphi^{(k)} = \left(\epsilon\left(\varphi^{(k)}\right)'\right)' + \rho\left(\varphi^{(k)}\right) \\ \varphi^{(k+1)} = \varphi^{(k)} + \delta\varphi^{(k)} \\ \delta\varphi^{(k)}(-t_{semic}) = 0 \\ \delta\varphi^{(k)}(t_{ins}) = 0\,. \end{cases}$$

per ogni iterazione k fino a convergenza, valutata sulla norma L^∞ dell'incremento.

È un'equazione integro-differenziale (diffusione-reazione) **lineare**, che dovrà essere discretizzata.

Discretizzazione effettuata ai volumi finiti:
metodo **BIM** (Box Integration Method).

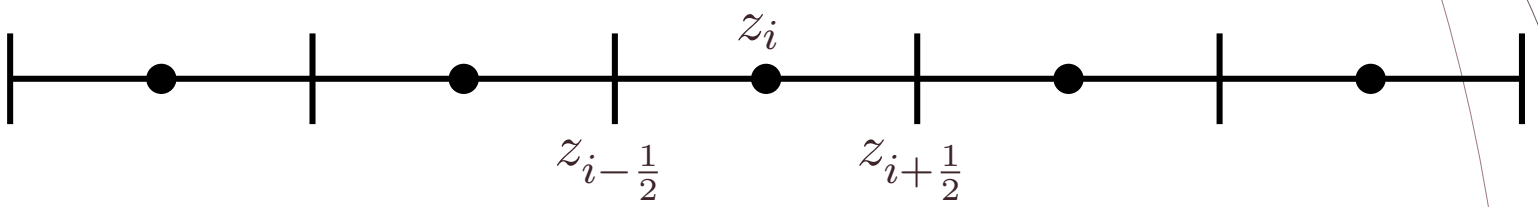
Spesso utile per equazioni in forma conservativa: $\frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{F}(u) = s(u)$
Si compone delle seguenti fasi:

1. creazione dei box;
2. scrittura del problema in forma integrale locale su ogni singolo box;
3. ipotesi di flusso costante e assemblaggio finale.

- Fase 1: Creazione dei box

  n sotto-domini di lunghezza $h = \frac{1}{n}$

  $\{\mathcal{B}_i\}_{i=1}^{n}, \mathcal{B}_i = \left(z_{i-\frac{1}{2}}, z_{i+\frac{1}{2}}\right)$



I volumi finiti approssimano la media su ogni box:

$$(u)_i \approx \frac{1}{h} \int_{z_{i-\frac{1}{2}}}^{z_{i+\frac{1}{2}}} u(z)\, \mathrm{d}z$$

- Fase 2: Formulazione integrale locale

  siano $f^{(k)} = \frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}\varphi}\left(\varphi^{(k)}\right)$ e $s^{(k)}$ il right-hand side dell'equazione

Integrando sull'i-esimo box:

$$-\int_{z_{i-\frac{1}{2}}}^{z_{i+\frac{1}{2}}} \left(\epsilon\left(\delta\varphi^{(k)}\right)'\right)' \,\mathrm{d}z - \int_{z_{i-\frac{1}{2}}}^{z_{i+\frac{1}{2}}} f^{(k)}\delta\varphi^{(k)}\mathrm{d}z = \int_{z_{i-\frac{1}{2}}}^{z_{i+\frac{1}{2}}} s^{(k)}\,\mathrm{d}z\,.$$

Indicando per semplicità con $F_{i\pm\frac{1}{2}} = -\epsilon(z_{i\pm\frac{1}{2}})\left(\delta\varphi^{(k)}\right)'(z_{i\pm\frac{1}{2}})$ l'approssimazione numerica del flusso attraverso i bordi $z_{i-\frac{1}{2}}$ e $z_{i+\frac{1}{2}}$ del box e dividendo per h:

$$\frac{F_{i+\frac{1}{2}} - F_{i-\frac{1}{2}}}{h} - \left(f^{(k)}\delta\varphi^{(k)}\right)_i = \left(s^{(k)}\right)_i\,.$$

- Fase 3: Assemblaggio finale
  problema: $\delta\varphi^{(k)}$ compare ancora sotto il segno di derivata

Sono state esplicitate delle relazioni tra la derivata e i valori “nodali” secondo lo schema di Scharfetter-Gummel.

- Fase 3: Assemblaggio finale
  problema: $\delta\varphi^{(k)}$ compare ancora sotto il segno di derivata

Sono state esplicitate delle relazioni tra la derivata e i valori "nodali" secondo lo schema di Scharfetter-Gummel.

Si giunge alla formulazione algebrica:

$$\begin{cases} \left(\mathcal{K} - \mathcal{M} \cdot \mathrm{diag}\left(\mathrm{d}\vec{\rho}^{(k)}\right)\right) \delta\vec{\varphi}^{(k)} = \mathcal{K} \cdot \vec{\varphi}^{(k)} - \mathcal{M} \cdot \mathrm{diag}\left(\vec{\rho}^{(k)}\right) \\ \vec{\varphi}^{(k+1)} = \vec{\varphi}^{(k)} + \delta\vec{\varphi}^{(k)} \end{cases}$$

dove:

- $\mathcal{K}$ matrice di stiffness;
- $\mathcal{M}$ matrice di massa (lumped).

Post-processing

Dopo aver risolto il sistema:

- si calcola la carica totale;
- si calcola la capacità elettrica totale.

Questo avviene all'interno di un loop in cui la tensione esterna V_g varia.

Dopo aver risolto il sistema:

- si calcola la carica totale;
- si calcola la capacità elettrica totale.

Questo avviene all'interno di un loop in cui la tensione esterna V_g varia.

Post-processing:

- si confrontano le curve $C(V_g)$ e $\frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}V_g}(V_g)$ sperimentali e simulate;
- si "allineano" i picchi della $\frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}V_g}(V_g)$: V_{shift} dipende da fenomeni non quantificabili (dipoli permanenti, cariche residue etc.):

$$V_{shift} = \arg\max_{V_g} \frac{\mathrm{d}C_{sim}}{\mathrm{d}V_g}\left(V_g; \tilde{X}\right) - \arg\max_{V_g} \frac{\mathrm{d}C_{exp}}{\mathrm{d}V_g}\left(V_g\right)$$

$$V_g \longleftrightarrow V_g + V_{shift}$$

Problemi di modellazione:

- V_{shift} non quantificabile “a priori”;
- $\exists$ capacità parassite (accoppiamento tra i contatti, linee di campo etc.) $\rightarrow$ capacità C_{sb} idealmente connessa in parallelo al MIS;
- misura dello spessore t_{semic} soggetta a errori sperimentali.

Problemi di modellazione:

- V_{shift} non quantificabile “a priori”;
- $\exists$ capacità parassite (accoppiamento tra i contatti, linee di campo etc.) $\rightarrow$ capacità C_{sb} idealmente connessa in parallelo al MIS;
- misura dello spessore t_{semic} soggetta a errori sperimentali.

$\longrightarrow$ algoritmo di **ottimizzazione**:

1. **Step 1**: si individua la $\sigma^{(k+1)}$ ottima in un range discreto di valori.
2. **Step 2**:

$$C_{sb}^{(k+1)} = C_{sb}^{(k)} + C_{exp}(V_{g,max}) - C_{sim}\left(V_{g,max}; \left[C_{sb}^{(k)}, t_{semic}^{(k)}, \sigma^{(k+1)}\right]\right)$$

3. **Step 3**:

$$t_{semic}^{(k+1)} = \epsilon_{semic}\left(\frac{1}{C_{exp}(V_{g,min}) - C_{sb}^{(k+1)}} - \frac{t_{ins}}{\epsilon_{ins}}\right)$$

Nel sistema lineare i termini integrali $\vec{\rho}$ e $\mathrm{d}\vec{\rho}$ devono essere approssimati.

$\longrightarrow$ formule di **quadratura**:

- Gauss-Hermite:

$$n(\varphi) = \frac{N_0}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha^2} \left(1 + \exp\left(\frac{\sqrt{2}\sigma\alpha - q\varphi}{k_B \cdot T}\right)\right)^{-1} \mathrm{d}\alpha$$

- Gauss-Laguerre:

$$n(\varphi) = \frac{N_0}{\lambda} \int_{0}^{+\infty} e^{-\alpha} \left(1 + \exp\left(\frac{\lambda\alpha - q\varphi}{k_B \cdot T}\right)\right)^{-1} \mathrm{d}\alpha$$

$$\Longrightarrow \int g(z) f(z)\, \mathrm{d}z \approx \sum_{i=1}^{N_g} w_i \cdot f(z_i)$$

e analogamente per la derivata ($\mathrm{d}\vec{\rho}$).

Implementati metodo **diretto** e **iterativo** per il calcolo di pesi e nodi.

Matrice del sistema **simmetrica**, **definita positiva**
$\longrightarrow$ fattorizzazione di **Cholesky** $A = LDL^T$
L triangolare inferiore e D diagonale

$A\vec{w} = \vec{b}$ diventa:

$$
\begin{aligned}
i) \quad & L\vec{x} = \vec{b} \\
ii) \quad & D\vec{y} = \vec{x} \\
iii) \quad & L^T\vec{w} = \vec{y}
\end{aligned}
$$

In alternativa: **Preconditioned Conjugate Gradient**. Un buon precondizionatore è basato sulla fattorizzazione LU incompleta.

Strumenti utilizzati

- `Eigen` (algebra lineare)
  - libreria template (non dev'essere compilata, velocità di esecuzione e portabilità, ma tempi di compilazione maggiori e code-bloat)
  - matrici e vettori ad allocazione dinamica
  - supporto per formato denso e sparso

Strumenti utilizzati

- `Eigen` (algebra lineare)
  - libreria template (non dev'essere compilata, velocità di esecuzione e portabilità, ma tempi di compilazione maggiori e code-bloat)
  - matrici e vettori ad allocazione dinamica
  - supporto per formato denso e sparso
- `GetPot` (parsing)
  - singolo header file
  - parsing file di configurazione (parametri numerici, file di input)
  - parsing linea di comando (path del file di configurazione)

Strumenti utilizzati

- `Eigen` (algebra lineare)
  - libreria template (non dev'essere compilata, velocità di esecuzione e portabilità, ma tempi di compilazione maggiori e code-bloat)
  - matrici e vettori ad allocazione dinamica
  - supporto per formato denso e sparso
- `GetPot` (parsing)
  - singolo header file
  - parsing file di configurazione (parametri numerici, file di input)
  - parsing linea di comando (path del file di configurazione)
- `OpenMP` (calcolo parallelo)
  - no message passing (memoria condivisa)
  - "facile" da implementare
  - una errata dichiarazione delle variabili può portare a errori come "`Segmentation fault.`"

Strumenti utilizzati

- `CMake` (configurazione e gestione delle dipendenze)
  - portabilità (anche verso sistemi operativi non Unix-like)
  - facile trovare dipendenze nel sistema
  - facile definizione dei target (libreria dinamica, install, doc etc.)

Strumenti utilizzati

- `CMake` (configurazione e gestione delle dipendenze)
  - portabilità (anche verso sistemi operativi non Unix-like)
  - facile trovare dipendenze nel sistema
  - facile definizione dei target (libreria dinamica, install, doc etc.)
- `Gnuplot` (generazione di plot)
  - interfaccia `gnuplot-iostream` per `C++` (richiede le `Boost`)
  - sintassi intuitiva, facile importare file `.csv`

Strumenti utilizzati

- `CMake` (configurazione e gestione delle dipendenze)
  - portabilità (anche verso sistemi operativi non Unix-like)
  - facile trovare dipendenze nel sistema
  - facile definizione dei target (libreria dinamica, install, doc etc.)
- `Gnuplot` (generazione di plot)
  - interfaccia `gnuplot-iostream` per `C++` (richiede le `Boost`)
  - sintassi intuitiva, facile importare file `.csv`
- `Valgrind` e `gdb` (profiling e debugging)
  - `Callgrind`: chiamata a metodi *getter* lenta
    $\rightarrow$ restituzione per `const &`
    $\rightarrow$ dichiarazione classi `friend`
  - `Memcheck`: nessun comportamento anomalo
  - `gdb`: "`Segmentation fault.`" risolto con `backtrace`

Strumenti utilizzati

- `CMake` (configurazione e gestione delle dipendenze)
  - portabilità (anche verso sistemi operativi non Unix-like)
  - facile trovare dipendenze nel sistema
  - facile definizione dei target (libreria dinamica, install, doc etc.)
- `Gnuplot` (generazione di plot)
  - interfaccia `gnuplot-iostream` per `C++` (richiede le `Boost`)
  - sintassi intuitiva, facile importare file `.csv`
- `Valgrind` e `gdb` (profiling e debugging)
  - `Callgrind`: chiamata a metodi *getter* lenta
    $\rightarrow$ restituzione per `const &`
    $\rightarrow$ dichiarazione classi `friend`
  - `Memcheck`: nessun comportamento anomalo
  - `gdb`: "`Segmentation fault.`" risolto con `backtrace`
- `git` (sistema di controllo di versione)
- `Doxygen` (documentazione)
- `Artistic style` (formattazione)

La classe `CsvParser`


```
1  CsvParser() = delete;
2  CsvParser(const std::string &, const bool & = true);
3
4  RowVectorXr importRow(const Index &);
5  MatrixXr    importRows(const std::initializer_list<Index> &);
6  ...
7  VectorXr    importCol(const Index &);
8  MatrixXr    importCols(const std::initializer_list<Index> &);
9  ...
10 Real        importCell(const Index &, const Index &);
11 MatrixXr    importAll();
```

Importa `.csv` (separati da virgola, tab, due punti o spazio) in strutture dati delle `Eigen`: legge i file contenenti i parametri da simulare e i dati sperimentali

La classe `ParamList`

SIM	SPESSORE SC [m]	SPESSORE INS [m]	EPSILON_R SC [~]	EPSILON_R INS [~]	T [K]	Wf [V]	Ea [V]	N0 [m
1	6.36E-008	0.000000476	2.9	2.82	295	5	3	
2	6.36E-008	0.000000476	2.9	2.82	295	5	3.2	
3	6.36E-008	0.000000476	2.9	2.82	295	5	3.4	
4	6.36E-008	0.000000476	2.9	2.82	295	5	3.6	
5	6.36E-008	0.000000476	2.9	2.82	295	5	3.8	
6	6.36E-008	0.000000476	2.9	2.82	295	5	4	

```
1  friend class     GaussianCharge;
2  friend class ExponentialCharge;
3  friend class            DosModel;
4
5  ParamList() = default;
6  explicit ParamList(const RowVectorXr &);
7   ...
```

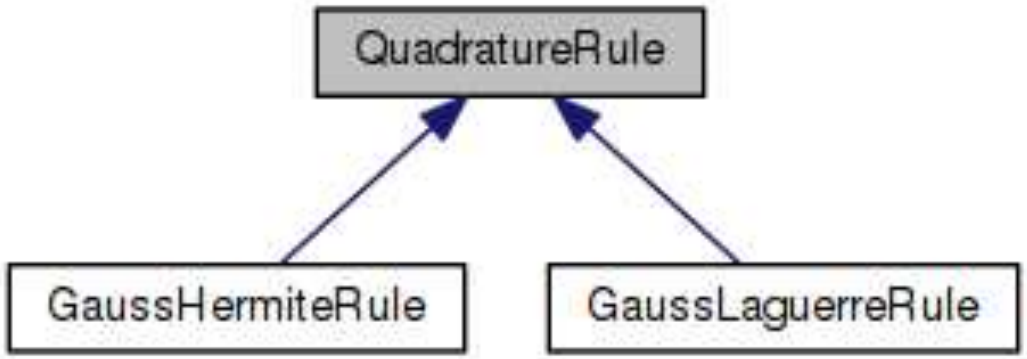
Gestisce i parametri della simulazione (parametri fisici, range di tensioni etc.).

Fornisce metodi *getter*/*setter* per leggerli/modificarli

La classe QuadratureRule


```
1  QuadratureRule() = delete;
2  QuadratureRule(const Index &);
3
4  virtual void apply() = 0;
5  ...
6
7  void apply_iterative_algorithm(const Index &, const Real &);
8  void apply_using_eigendecomposition();
```

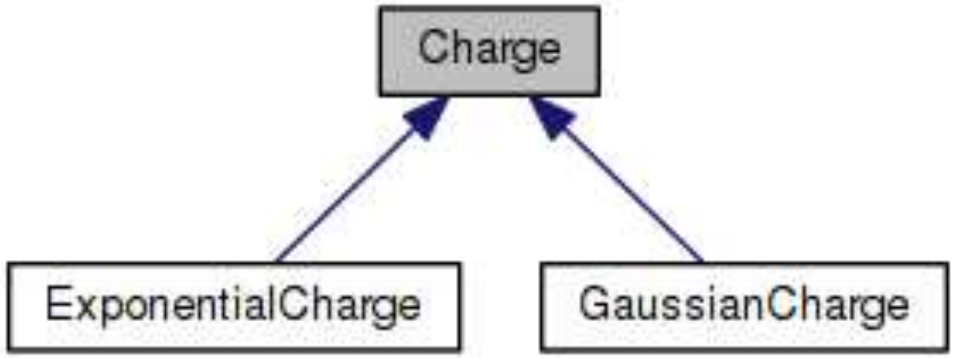
Implementa gli algoritmi (diretto e iterativo) per calcolare nodi e pesi.



La classe `Charge`


```
1 Charge() = delete;
2 Charge(const ParamList &, const QuadratureRule &);
3
4 virtual VectorXr  charge(const VectorXr &) const = 0;
5 virtual VectorXr dcharge(const VectorXr &) const = 0;
```

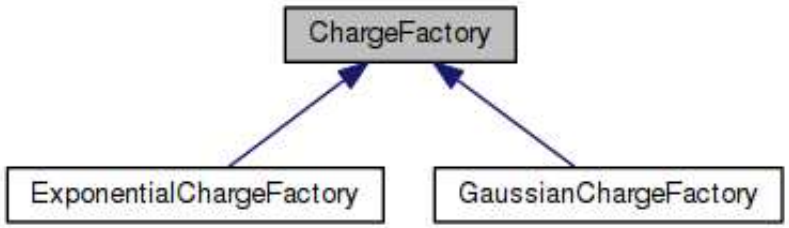
Utilizzando le formule di quadratura, assembla i termini $\vec{\rho}$ e $\mathrm{d}\vec{\rho}$.



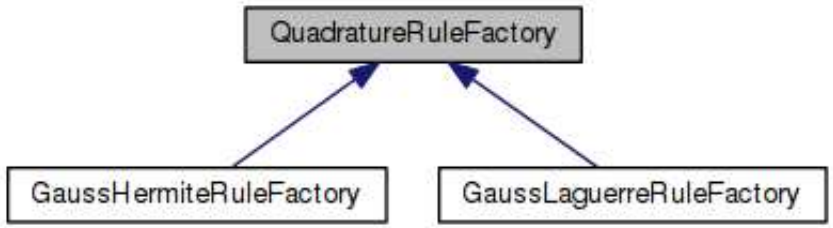
Le abstract factory


```
1 class ChargeFactory {
2     virtual Charge * BuildCharge(const ParamList &, const
          QuadratureRule &) = 0;
3 };
```

```
1 class QuadratureRuleFactory {
2     virtual QuadratureRule * BuildRule(const Index &) = 0;
3 };
```



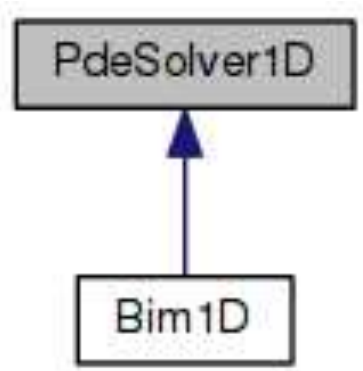
(a) ChargeFactory



(b) QuadratureRuleFactory

Design Pattern *creazionale*

```
1  class PdeSolver1D {
2      PdeSolver1D() = delete;
3      PdeSolver1D(VectorXr &);
4
5      virtual void assembleAdvDiff(...) = 0;
6      virtual void assembleStiff  (...) = 0;
7      virtual void assembleMass   (...) = 0;
8      ...
9  };
```




```
1  class NonLinearPoisson1D {
2      NonLinearPoisson1D(const PdeSolver1D &, const Index &, const
           Real &);
3      void apply(const VectorXr &, const VectorXr &, const Charge &);
4      ...
5  };
```

La classe `DosModel`


```
1 explicit DosModel(const ParamList &);
2
3 void simulate(...);
4 void post_process(...);
5
6 void save_plot(...) const;
7 ...
```

Il metodo `simulate()` esegue la simulazione ed effettua il post-processing, che salva in output i risultati:

- `_info.txt`, contenente informazioni sull'andamento della simulazione;
- `_CV.csv`, contenente i valori simulati e sperimentali della curva $C(V_g)$ e della sua derivata;
- `_plot.png`, contenente il plot di confronto;
- `_plot.gp`, lo script `Gnuplot` con cui è stato ottenuto.

Casi test

- `simulate_dos`

  1. definiti oggetti `GetPot`;
  2. vengono letti i nomi dei file di input, le simulazioni da effettuare, il numero di thread e i nomi delle directory di output;
  3. loop parallelo: ogni thread crea un `DosModel`;
  4. viene chiamato il metodo `simulate`.

Casi test

- `simulate_dos`

  1. definiti oggetti `GetPot`;
  2. vengono letti i nomi dei file di input, le simulazioni da effettuare, il numero di thread e i nomi delle directory di output;
  3. loop parallelo: ogni thread crea un `DosModel`;
  4. viene chiamato il metodo `simulate`.

- `fit_dos`

  All'interno del loop di ottimizzazione:

  1. viene individuata $\sigma^{(k+1)}$, eseguendo in parallelo tutte le simulazioni al variare del parametro nel range;
  2. viene calcolato $C_{sb}^{(k+1)}$;
  3. viene calcolato $t_{semic}^{(k+1)}$.

Condensatore MIS di tipo n, basato su P(NDI2OD-T2).
La forma considerata per la DOS è gaussiana (singola o doppia).

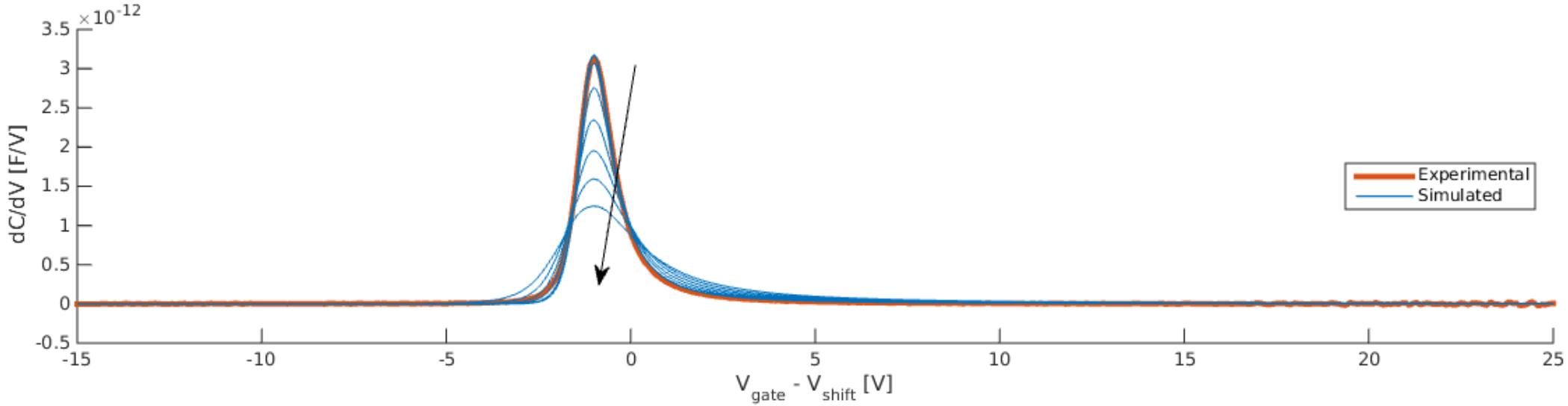
Dati concessi dal **CNST** dell'*Istituto Italiano di Tecnologia*

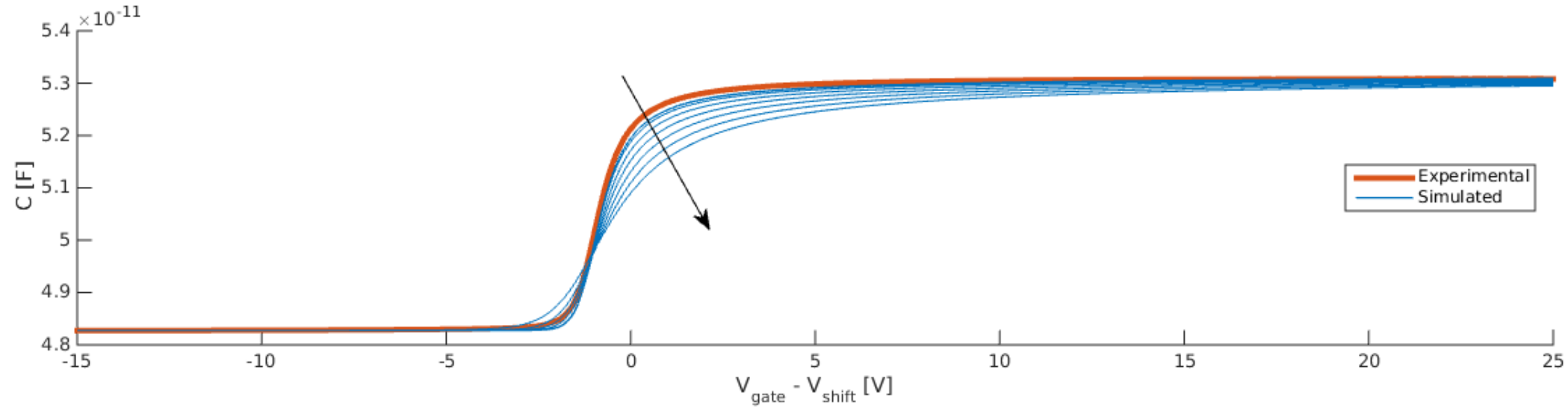
Dieci gruppi di simulazioni, al variare di:

1. σ
2. N_0
3. Φ_B
4. σ_2
5. $\varphi s, 2$ (shift della seconda gaussiana)
6. numero di nodi della mesh
7. numero di suddivisioni per V_g
8. range per V_g
9. temperatura T (gaussiana singola)
10. temperatura T (gaussiana doppia)

Simulazioni: al variare di σ

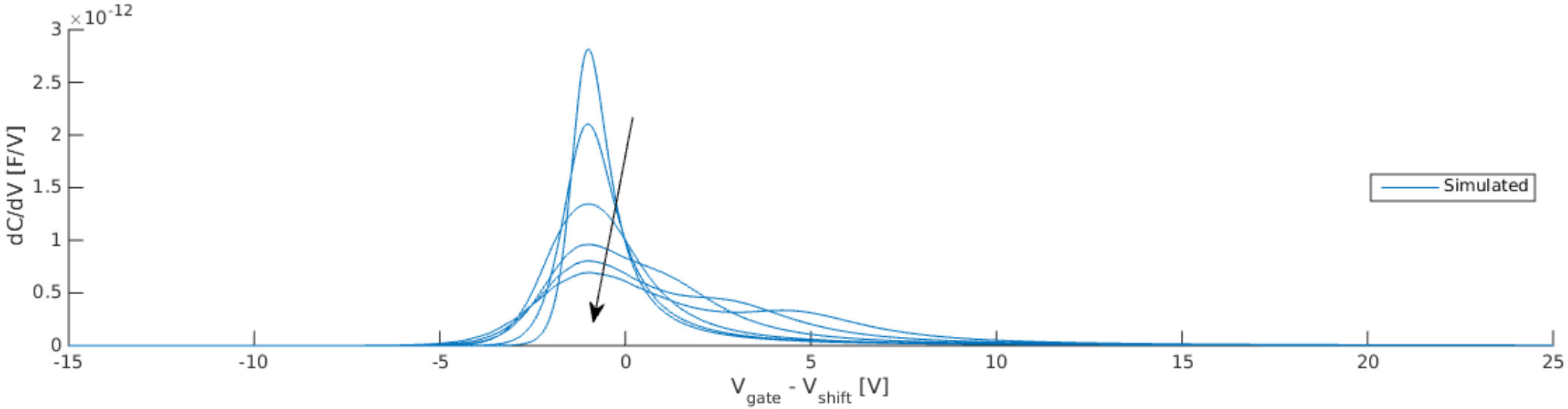
$N_0 = 10^{27} m^{-3}$, σ varia da 1 a 10.5 $k_B \cdot 300K$

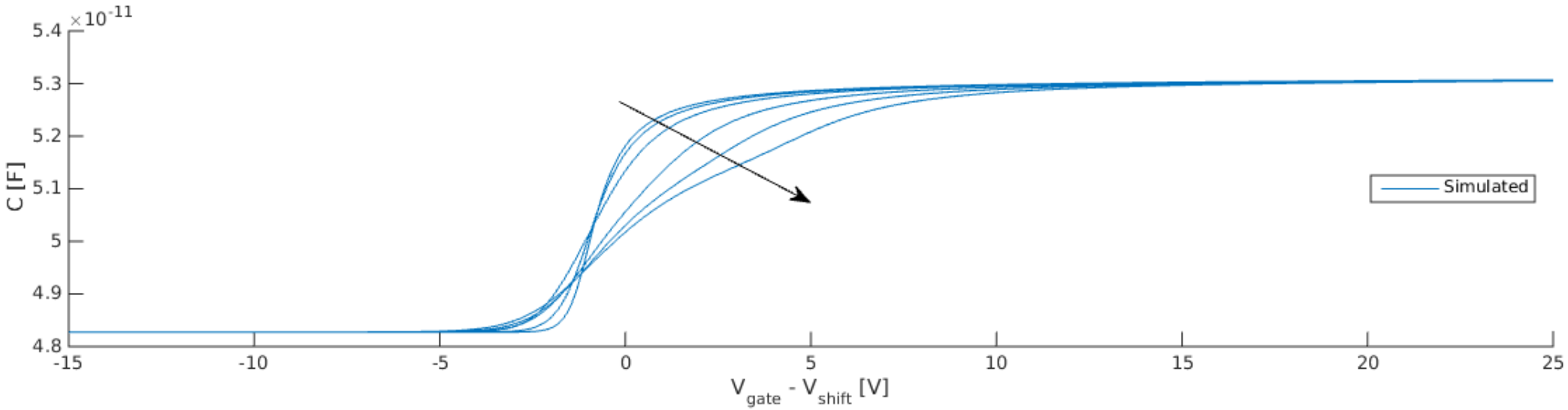




Simulazioni: al variare di σ_2

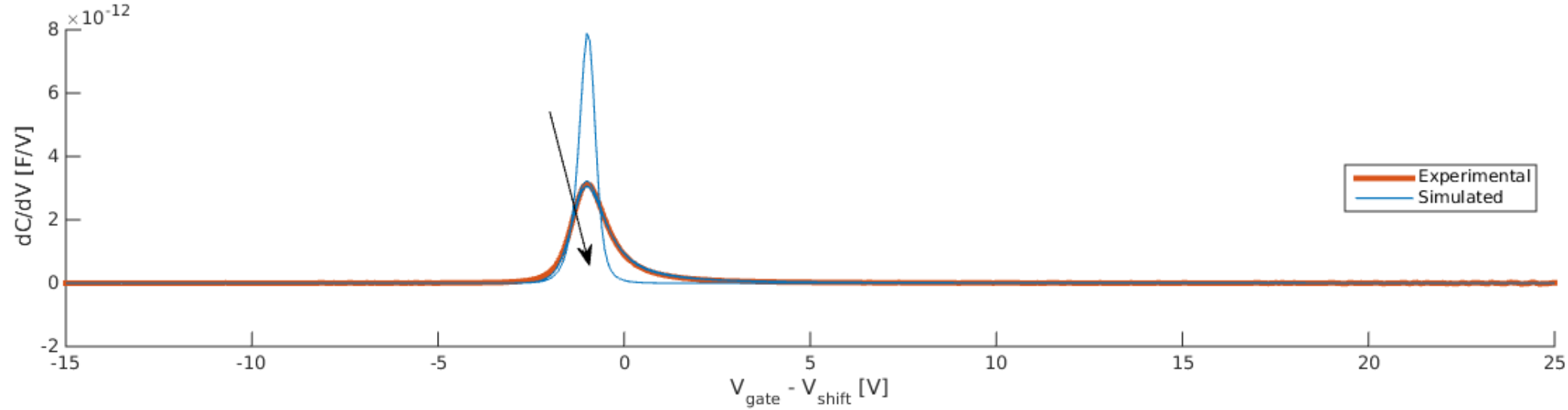
$N_0 = 10^{27}$, $\sigma = 3$, $N_{0,2} = 10^{24}$, σ_2 varia da 4 a 9.5, $\varphi_{s,2} = 0.1V$

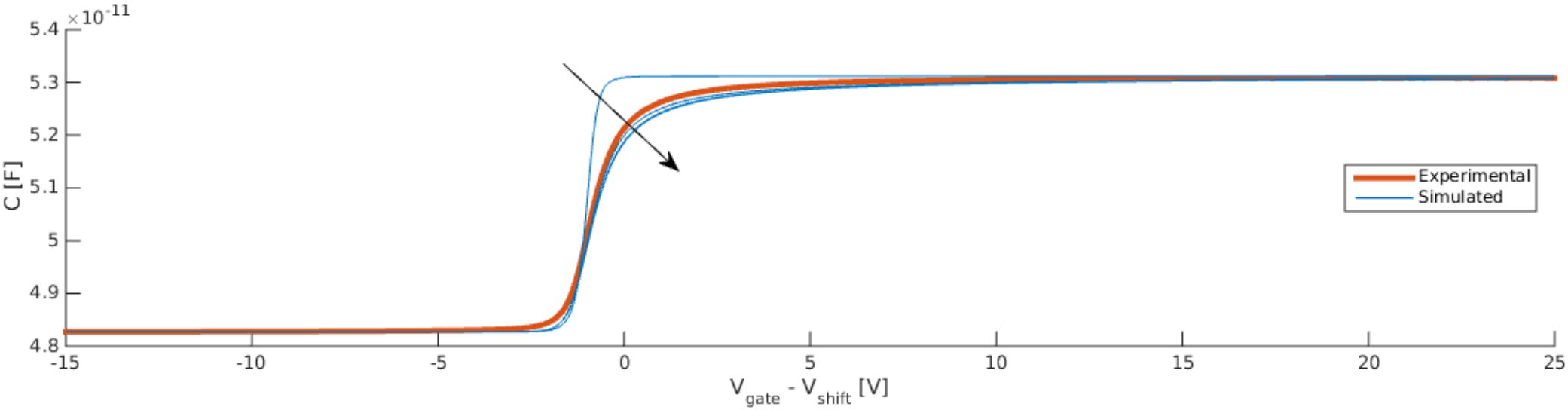




Simulazioni: al variare del range di V_g

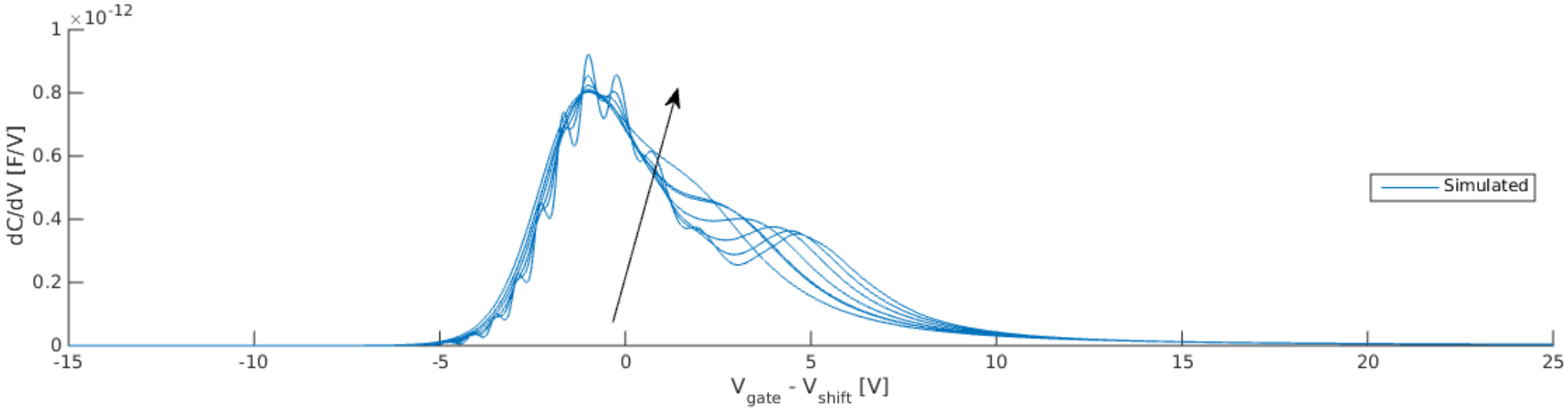
$N_0 = 10^{27}$, $\sigma = 3$, la dimensione del range varia da 1000 a 8000 step

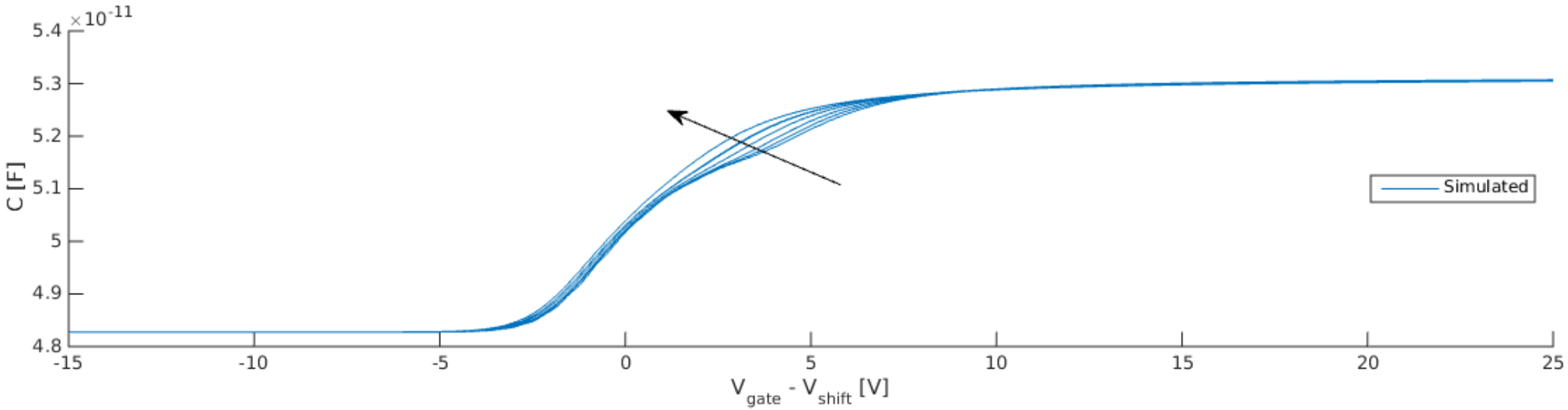




Simulazioni: al variare di T

$N_{0,2} = 10^{25}$, $\sigma_2 = 8$, $\varphi_{s,2} = 0.1$, T varia da 100 a $350K$





Eseguito su alcuni casi notevoli. Numero di iterazioni pari a 3.
Simulazioni al variare di σ in $[\sigma - 2, \sigma + 3]$.
C_{sb} e t_{semic} convergono a $1.06649 \cdot 10^{-11} F$ e $63.49 nm$

Eseguito su alcuni casi notevoli. Numero di iterazioni pari a 3.
Simulazioni al variare di σ in $[\sigma - 2, \sigma + 3]$.
C_{sb} e t_{semic} convergono a $1.06649 \cdot 10^{-11} F$ e $63.49 nm$

Norma scelta: H^1

Partendo da $\sigma = 3.5$:

Iterazione	$\sigma_{opt}[k_B \cdot 300K]$
1	1.5
2	0.8
3	0.1

Partendo da $\sigma = 4.5$:

Iterazione	$\sigma_{opt}[k_B \cdot 300K]$
1	2.5
2	0.5
3	0.1

Partendo da $\sigma = 5$:

Iterazione	$\sigma_{opt}[k_B \cdot 300K]$
1	3
2	1
3	1

Partendo da $\sigma = 6$:

Iterazione	$\sigma_{opt}[k_B \cdot 300K]$
1	4
2	2
3	0.1

Eseguito su alcuni casi notevoli. Numero di iterazioni pari a 3.
Simulazioni al variare di σ in $[\sigma - 2, \sigma + 3]$.
C_{sb} e t_{semic} convergono a $1.06649 \cdot 10^{-11} F$ e $63.49 nm$

Norma scelta: distanza tra i picchi in $\frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}V_g}$

Partendo da $\sigma = 3.5$:

Iterazione	$\sigma_{opt}[k_B \cdot 300K]$
1	1.5
2	0.1
3	0.1

Partendo da $\sigma = 4.5$:

Iterazione	$\sigma_{opt}[k_B \cdot 300K]$
1	2.5
2	0.5
3	0.3

Partendo da $\sigma = 5$:

Iterazione	$\sigma_{opt}[k_B \cdot 300K]$
1	3
2	1
3	0.1

Partendo da $\sigma = 6$:

Iterazione	$\sigma_{opt}[k_B \cdot 300K]$
1	4
2	2
3	0.1

Possibili sviluppi

- Geometria più realistica in $\mathbf{2D}$ o $\mathbf{3D}$;
- regime non quasi-statico o tempo-variante (sistema completo drift-diffusion);
- migliorare l'algoritmo di fitting, formalizzandolo dal punto di vista teorico e numerico;
- **ottimizzazione multi-obiettivo** (forme più complesse per la DOS);
- effetti di adattività di griglia (l'area vicino al "picco" della derivata soggetta a variazioni).

Conclusioni

- Risultati coerenti con `Octave` (errore $< 0.1\%$)
  stesso metodo, diversa implementazione tra `Eigen` e `Cholmod`;
- il solutore ha un'influenza trascurabile sia nei tempi di esecuzione che nei risultati (confronti tra Cholesky e `BiCGSTAB`);
- esecuzione molto più veloce:
  8 core (hyperthreading) @ $2.2GHz$:
  - `Octave` 30 minuti vs. `C++` 16 secondi
  - `Octave` $2+$ ore vs. `C++` 8 minuti

Grazie per l’attenzione