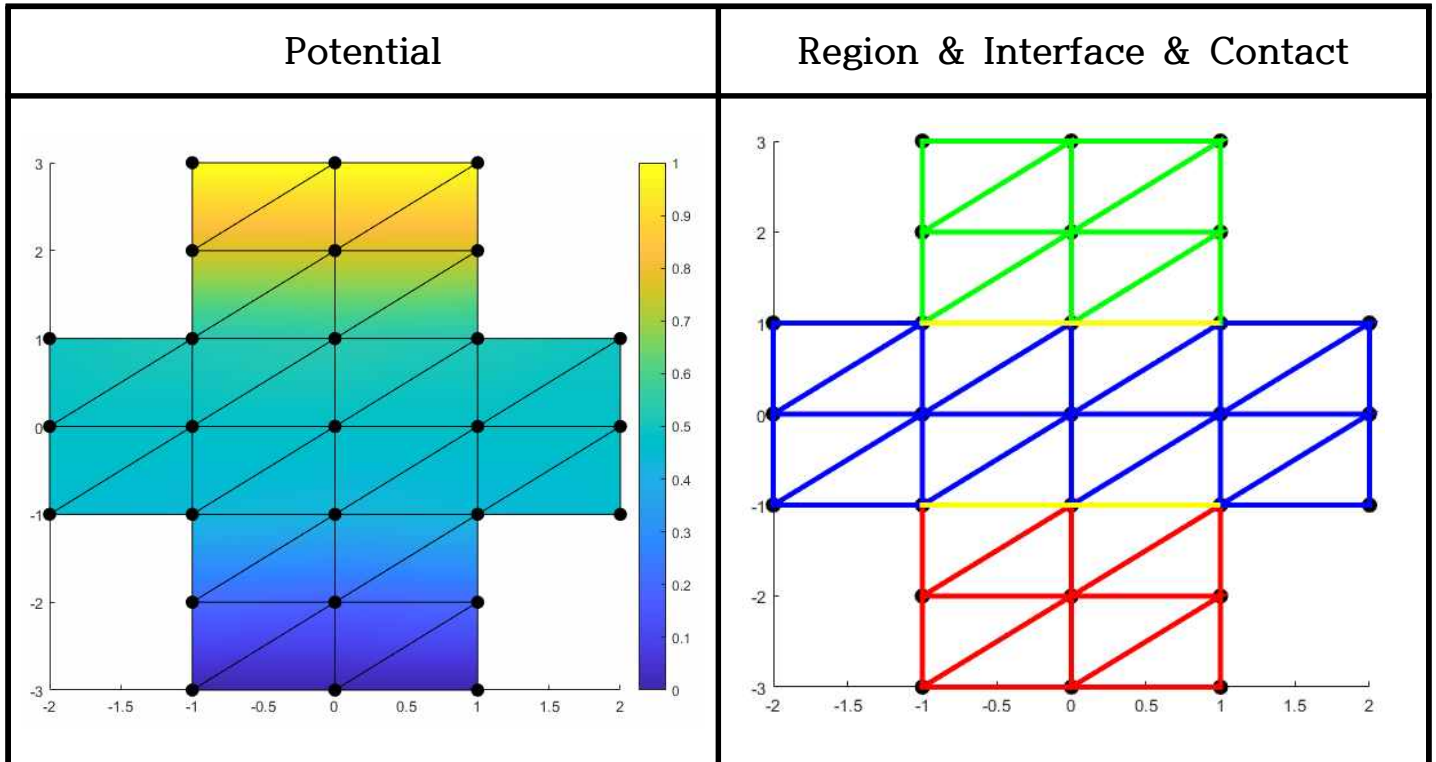


HW10_revision

20211119 박 건 호

1번 Structure



Region

Red, Green region : Oxide (3.9) , Region 1, 3

White region : Silicon (11.7), Region 2

Interface vertex

Interface Vertex 수 : 총 6 개 (8,9,10 / 18,19,20)

전체 Jacobian 수 : $27 + 6 = 33 * 33$ matrix

Silicon Region의 Electron, Hole Density를 고려하면, Blue region인 Silicon region의 Vertex 수를 $3*N$ 해줘야한다. 따라서, 이를 바탕으로 전체 Jacobian의 크기는 다음과 같다.

Oxide vertex : $9+9 = 18$

Silicon vertex : $15*3 = 45$

따라서 $18 + 45 = 63$

Jacobian은 $63*63$ matrix를 구성한다.

Nonlinear Poisson (Fully-Coupled)

기존에 코드에 많은 문제가 있어서 전반적으로 수정하였다. 가장 큰 차이점은 Table을 활용하는 것이다. Table의 열을 활용해서 Region, Vertex, Variable을 지정하여 Matrix를 구성한다.

Oxide region (region 1,3)

Oxide region은 Charge가 존재하지 않기 때문에, 고려해줄 필요가 없고, electron, hole의 Density도 수업에서 들은 것과 같이 필요가 없어 지금까지 사용한 Code를 그대로 사용하면 된다.

$$res_1 : \epsilon_x \left(- \left(\frac{A_1}{L_1} + \frac{A_3}{L_3} \right) \phi_1 + \frac{A_1}{L_1} \phi_2 + \frac{A_3}{L_3} \phi_3 \right)$$

$$res_2 : \epsilon_x \left(\frac{A_1}{L_1} \phi_1 - \left(\frac{A_1}{L_1} + \frac{A_2}{L_2} \right) \phi_2 + \frac{A_2}{L_2} \phi_3 \right)$$

$$res_3 : \epsilon_x \left(\frac{A_3}{L_3} \phi_1 + \frac{A_2}{L_2} \phi_2 - \left(\frac{A_2}{L_2} + \frac{A_3}{L_3} \right) \phi_3 \right)$$

$$Jacobian_{11} = \epsilon_x \left(- \left(\frac{A_1}{L_1} + \frac{A_3}{L_3} \right) \right), \quad Jacobian_{12} = \epsilon_x \frac{A_1}{L_1}, \quad Jacobian_{13} = \epsilon_x \frac{A_3}{L_3}$$

$$Jacobian_{21} = \epsilon_x \frac{A_1}{L_1}, \quad Jacobian_{22} = \epsilon_x \left(- \left(\frac{A_1}{L_1} + \frac{A_2}{L_2} \right) \right), \quad Jacobian_{23} = \epsilon_x \frac{A_2}{L_2}$$

$$Jacobian_{31} = \epsilon_x \frac{A_3}{L_3}, \quad Jacobian_{32} = \epsilon_x \frac{A_2}{L_2}, \quad Jacobian_{33} = \epsilon_x \left(- \left(\frac{A_2}{L_2} + \frac{A_3}{L_3} \right) \right)$$

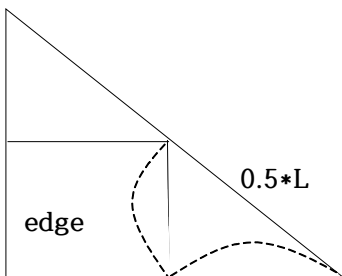
Silicon Region (region 2)

Silicon Region의 flux는 위와 같은 수식을 사용하면 되지만, 이전과 다른 점은 Charge를 고려해야 하는 것이다. 수업에서 들은 것과 같이 Charge의 수식을 작성하면 다음과 같다.

$$\rho = q(N_{dop}^+ - elec + hole)$$

하지만, 이 부분을 고려하기 위해서 지금까지 과제에서는 크게 신경 쓰지 않은 부분을 작성해줘야 한다.

먼저, ϵ_0 이다. 현재는 $\epsilon_{si}, \epsilon_{ox}$ 를 11.7, 3.9로 설정하고 사용했지만, 큰 전제에서 ϵ_0 을 양변에 나눈 것이므로 이 부분을 잘 고려해야 한다. 또한, 한 Node 당 Control Volume에 따라서 Charge의 값이 바뀌므로 이 부분도 고려해야 한다. 이 수식은 다음과 같다.



$$Control\ Volume = \frac{1}{2} \times \frac{1}{2} \times L \times edge$$

이 CV의 값을 위의 charge 수식에 곱하여 res, Jaco를 설정해야 한다.

또한, Silicon Region에는 electron과 Hole의 Density를 고려해야 한다. 따라서 그에 따른 res와 Jacobian을 고려해주면 다음과 같다.

$$res_e = elec - n_i(\exp(\frac{\phi}{V_T})), res_h = hole - n_i(\exp(\frac{-\phi}{V_T}))$$

$$Jacobian_{ee} = 1, Jacobian_{hh} = 1$$

$$Jacobian_{e,\phi} = -\frac{n_i}{V_T}(\exp(\frac{\phi}{V_T})), Jacobian_{h,\phi} = -\frac{n_i}{V_T}(\exp(\frac{-\phi}{V_T}))$$

이 세 가지 수식을 Silicon region에 Potential, elec, hole 순으로 matrix를 제작하였는데, 각각의 Node에 따라서 Potential은 3*n-2, electron은 3*n-1, Hole = 3*n의 규칙을 가지고 Jacobian과 residue에 입력하였다.

2) Re-indexing

Table의 모습은 다음과 같다.

Region	Vertex	Variable
1	1	1
1	2	1
1	3	1
1	4	1
1	5	1
1	6	1
1	8	1
1	9	1
1	10	1
2	7	1
2	8	2
2	9	3
.	.	.
.	.	.
.	.	.
.	.	.
2	18	3
2	19	1
2	20	2
2	21	3
3	18	1
3	19	1
3	20	1
3	22	1
3	23	1
3	24	1
3	25	1
3	26	1
3	2	1

*

Potential : 1

eDensity : 2

hDensity : 3

Jacobian Re-Indexing

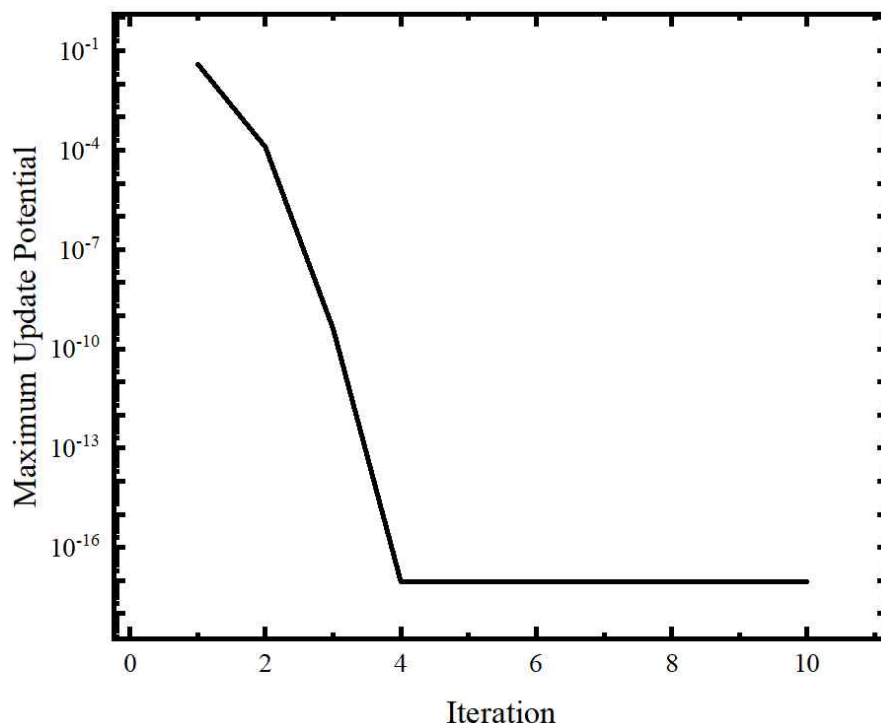
지금까지 Jacobian을 제작할 때, 전체 Vertex의 index가 Jacobian의 index가 되어야 한다는 생각이 지배적이라, region 별로 interface를 고려하거나, Density를 coupled 하는 등의 작업에서 이해 없이 진행하였다. 하지만, 지난번 수업을 통해 이 부분의 이해도를 높였고, 그 결과 다음과 같은 코드를 제작하였다.

위와 같이 Table을 제작하여 Find 함수를 활용해 해당하는 값을 찾고, 그 값의 Table index를 활용하여 Jacobian을 제작하였다. 또한, if 문을 활용하여 Variable에 따라서 equation을 Jacobian에 넣는 것도 분리해 실제 추가로 풀어야 할 equation이 생긴다면, 적용이 가능하다.

하지만, Density를 Potential과 coupled 했을 때 두 값의 scale 차이로 인해서 발생하는 특이행렬 문제가 있었는데, 교수님 Youtube의 Scaling 관련한 내용을 공부하여 이를 적용시켜 문제를 해결하였다. 또 다른 수정한 부분은, 지금까지는 Interface Vertex index를 직접 지정하여 interface flux의 값을 Jacobian 내에서 수정했는데, 이를 기존의 Interface를 구한 것과 for 문을 활용하여 자동화를 진행했다.

Jacobian의 Newton iteration은 10회 실행하였으며, 실제 수렴은 4회에서 수렴하는 것을 확인했다.

다음과 같은 모습으로 quadratic Convergence를 확인하였습니다.



Results

Potential			Electron Density			Hole Density		
1	0.3337	Interface1 index region 1 : 7 8 9 region 2: 11,12,13 == Vertex index : 8 9 10	1		interface1,2는 Potential과 같이 지 정하였다.	1		interface1,2는 Potential과 같이 지 정하였다.
2	0.3337		2	0		2	0	
3	0.3337		3	0		3	0	
4	0.3244		4	0		4	0	
5	0.3245	Interface2 Index region 2: 21,22,23 region 3: 25,26,27 == Vertex index : 18 19 20	5	0	Density는 Oxide의 region에는 존재하지 않기 때문에 실리콘 region의 값만 존재 한다.	5	0	Density는 Oxide의 region에는 존재하 지 않기 때문에 실 리콘 region의 값만 존재한다.
6	0.3244		6	0		6	0	
7	0.3148		7	8.3979e+21		7	1.1908e+10	
8	0.3155		8	8.1506e+21		8	1.2269e+10	
9	0.3148		9	8.3979e+21		9	1.1908e+10	
10	0.3137		10	1.8601e+21		10	5.3759e+10	
11	0.3148		11	1.9371e+21		11	5.1624e+10	
12	0.3155		12	1.9960e+21		12	5.0101e+10	
13	0.3148		13	1.9371e+21		13	5.1624e+10	
14	0.3137		14	1.8601e+21		14	5.3759e+10	
15	0.3134		15	1.8406e+21		15	5.4331e+10	
16	0.3139		16	1.8766e+21		16	5.3288e+10	
17	0.3143		17	1.9066e+21		17	5.2450e+10	
18	0.3139		18	1.8766e+21		18	5.3288e+10	
19	0.3134		19	1.8406e+21		19	5.4331e+10	
20	0.3137		20	1.8601e+21		20	5.3759e+10	
21	0.3148		21	1.9371e+21		21	5.1624e+10	
22	0.3155		22	1.9960e+21		22	5.0101e+10	
23	0.3148		23	1.9371e+21		23	5.1624e+10	
24	0.3137		24	1.8601e+21		24	5.3759e+10	
25	0.3148		25	8.3979e+21		25	1.1908e+10	
26	0.3155		26	8.1506e+21		26	1.2269e+10	
27	0.3148		27	8.3979e+21		27	1.1908e+10	
28	0.3244		28	0		28	0	
29	0.3245		29	0		29	0	
30	0.3244		30	0		30	0	
31	0.3337		31	0		31	0	
32	0.3337		32	0		32	0	
33	0.3337		33	0		33	0	