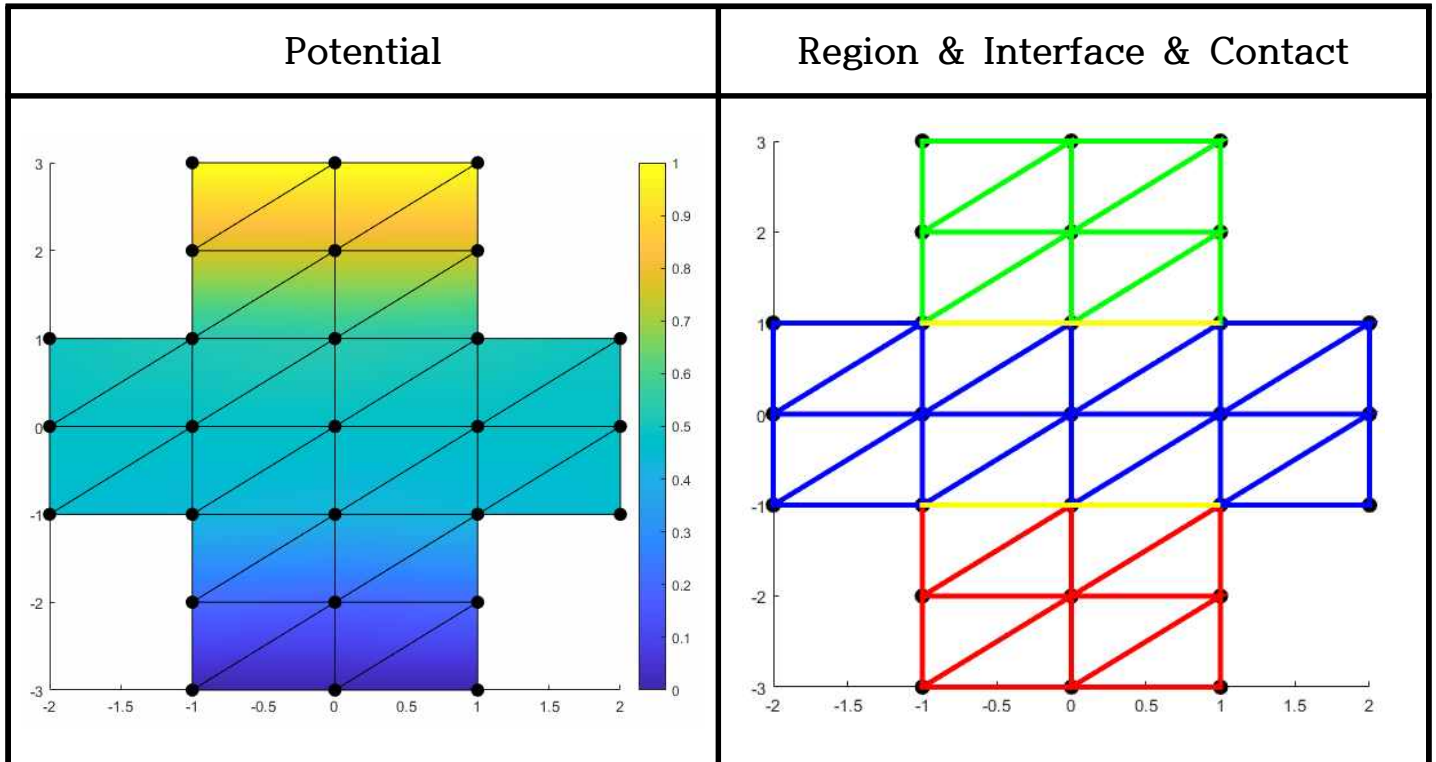


HW10

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)

Electrostatic Potential, electron, hole을 구하기 위해서 residue, Jacobian을 설정하면 다음과 같다.

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.

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

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

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

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

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

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

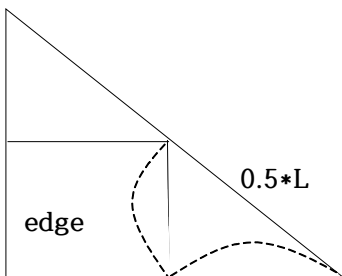
Silicon Region (region 2)

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

다양한 방법이 있지만, 채택한 방법은 기존에 element, vertex 파일을 최대한 활용하기 위해서 region 별로 새로운 Jacobian을 만들어, 새로운 indexing을 고려하여 63*63 matrix를 제작하는 방법으로 진행하였다. 실제 Jacobian을 re-indexing 하기 위해서 새로운 index에 어떤 값이 들어가는지 확인하기 위해서 밑과 같은 표를 제작하였다. 이전의 과제에서 했던 것처럼 Interface의 node를 region 별로 고려해주면서 Jacobian을 생성하였다.

Jacobian Re-Indexing

mesh index	Re-index
1	1
2	2
3	3
4	4
5	5
6	6
8 (interface_region1)	7 (interface_region1)
9 (interface_region1)	8 (interface_region1)
10 (interface_region1)	9 (interface_region1)
7-phi	10
7-elec	11
7-hole	12
8-phi (interface_region2)	13 (interface_region2)
8-elec	14
8-hole	15
9-phi (interface_region2)	16 (interface_region2)
9-elec	17
9-hole	18

Region 1 (Oxide)

Region 2 (Silicon)

10-phi (interface_region2)	19 (interface_region2)
10-elec	20
10-hole	21
.	.
.	.
.	.
18-phi (interface_region2)	43 (interface_region2)
18-elec	44
18-hole	45
19-phi (interface_region2)	46 (interface_region2)
19-elec	47
19-hole	48
20-phi (interface_region2)	49 (interface_region2)
20-elec	50
20-hole	51
21-phi	52
21-elec	53
21-hole	54
18 (interface_region3)	55 (interface_region3)
19 (interface_region3)	56 (interface_region3)
20 (interface_region3)	57 (interface_region3)
22	58
23	59
24	60
25	61
26	62
27	63

Region 2 (Silicon)

Region 3 (Oxide)

이를 바탕으로 Fully-Coupled 된 Nonlinear poisson을 풀기 위해서 Jacobian과 residue를 제작해야 한다. 하지만, 다양한 구조 적용하기 위해서는 region 별로 제작한 Jacobian을 합칠 때 값일 가지지 않은 row가 없도록 해야 하며 원하는 기능을 모두 수행해야 하지만 아직 이 부분의 구현이 되지 않아서 수동으로 진행하기도 했다. 그렇지만, residue의 생성은 잘 된 것을 확인하였으나, Jacobian의 debugging이 아직 남아 있어서 정확한 값을 생성하지 못했다.

* Nonlinear Poisson (예제 2.11.1과 같은 방식)

삼각형 mesh의 일반화된 Nonlinear-Poisson을 제작하였다. coupled 이전에 삼각형 mesh에 대한 전반적인 개념 이해가 필요했기 때문에 이와 같은 코드를 제작하였다.

구조는 위의 구조를 사용했지만, 지금까지 사용한 구조에 대해서 모두 계산가능하다.

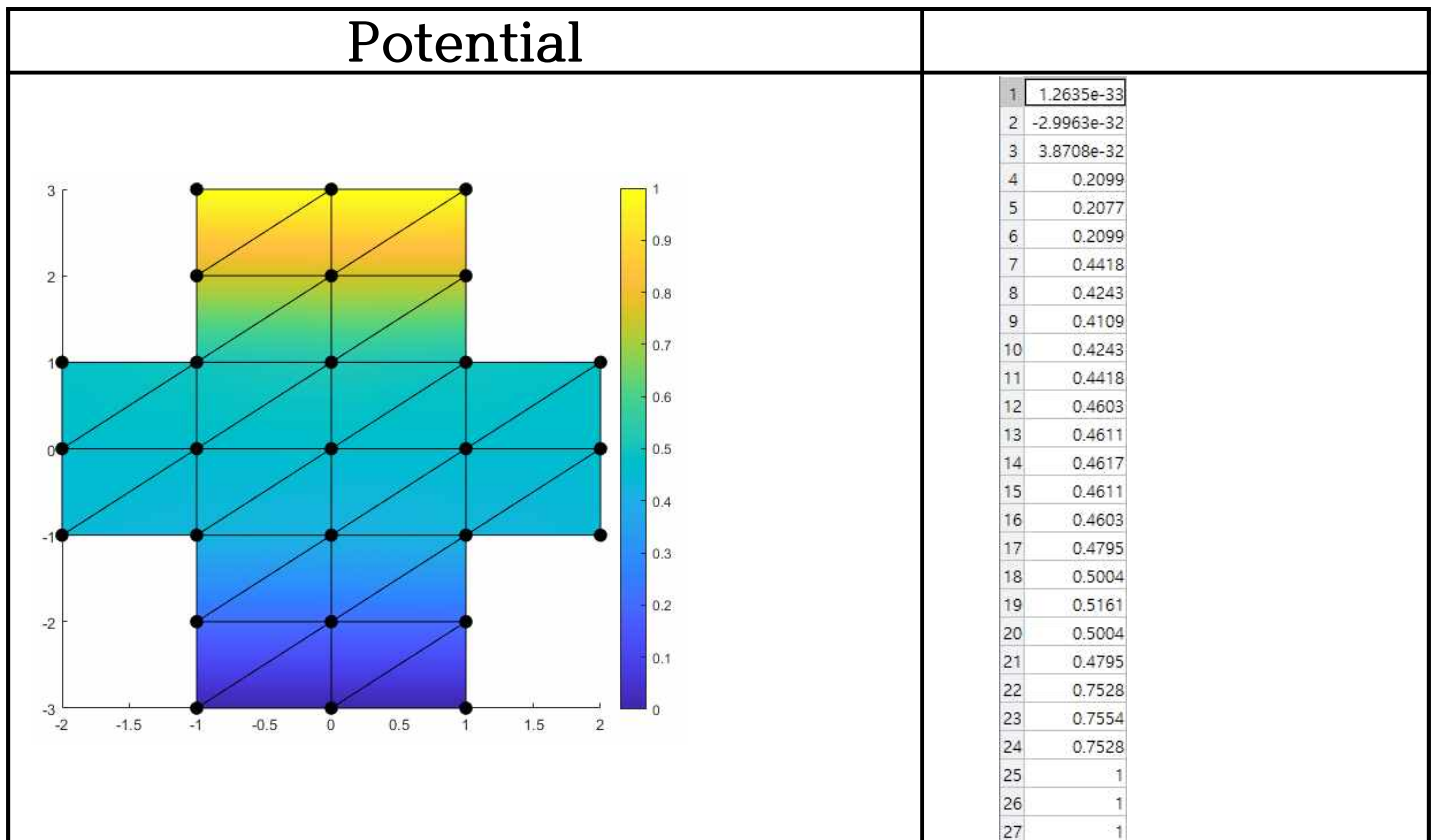
위의 Coupled에서 언급한 식을 모두 사용하면 되지만, 다른 부분이 있다면, Charge를 고려하는 것이다. 이 경우에 charge 식은 다음과 같다.

$$\rho = q(N_{dop}^+ - n_i(\exp(\frac{\phi}{V_T})) + n_i(\exp(\frac{-\phi}{V_T})))$$

이 식을 통해서 Charge를 고려하면 되고, Jacobian을 형성할 때 역시 이 부분의 미분을 통해서 잘 고려해주면 된다.

Results

Nonlinear Poisson을 통해서 구한 Potential은 다음과 같다.



이 Potential을 활용하면 Electron과 Hole을 구할 수 있고, 이는 예제와 같은 방식을 사용하면 구할 수 있다.

Convergence Check (newton = 10회)

Newton 10회 안에 $1e-16 \sim 17$ 승 이하로 수렴하는 것을 확인하였다.

1	5.6132e-18	2.0525e-21	5.5810e-20	1.4455e-21	8.8494e-26	1.0265e-33	2.3428e-33	-7.3870e-34	-7.3870e-34	-7.3870e-34
2	-7.2571e-17	3.1131e-18	-1.3193e-18	-2.9465e-20	7.4673e-25	1.1826e-31	-3.7462e-33	-2.9758e-33	3.3452e-33	-2.9758e-33
3	6.3333e-18	-1.4187e-17	1.4871e-18	1.1948e-20	-9.0684e-26	-6.0506e-32	1.0306e-32	1.0306e-32	-1.4978e-32	1.0306e-32
4	-0.0041	-3.9762e-04	-2.9755e-06	-1.6306e-10	-7.8849e-19	-5.2050e-18	-6.2979e-18	-6.2979e-18	-6.2979e-18	-6.2979e-18
5	-0.0041	-3.9239e-04	-2.9367e-06	-1.6094e-10	2.0307e-17	-1.0644e-17	-1.1456e-17	-1.1456e-17	-1.1456e-17	-1.1456e-17
6	-0.0041	-3.9757e-04	-2.9754e-06	-1.6306e-10	-1.6405e-18	-6.0008e-18	-6.7245e-18	-6.7245e-18	-6.7245e-18	-6.7245e-18
7	-0.0088	-8.4917e-04	-6.3513e-06	-3.4803e-10	3.0091e-17	-3.8836e-17	1.4447e-17	1.4447e-17	1.4447e-17	1.4447e-17
8	-0.0083	-8.0569e-04	-6.0285e-06	-3.3037e-10	1.3167e-17	4.6825e-19	-2.2789e-18	-2.2789e-18	-2.2789e-18	-2.2789e-18
9	-0.0080	-7.7435e-04	-5.7960e-06	-3.1765e-10	2.6721e-17	1.1330e-17	9.8978e-18	9.8978e-18	9.8978e-18	9.8978e-18
10	-0.0083	-8.0552e-04	-6.0281e-06	-3.3036e-10	9.7594e-18	-2.7149e-18	-3.9853e-18	-3.9853e-18	-3.9853e-18	-3.9853e-18
11	-0.0088	-8.4890e-04	-6.3507e-06	-3.4802e-10	2.7533e-17	1.4487e-17	1.4189e-17	1.4189e-17	1.4189e-17	1.4189e-17
12	-0.0092	-8.8422e-04	-6.6118e-06	-3.6228e-10	2.3010e-17	8.8085e-18	7.0458e-18	7.0458e-18	7.0458e-18	7.0458e-18
13	-0.0090	-8.6928e-04	-6.5037e-06	-3.5640e-10	3.7451e-17	-3.2173e-17	2.1303e-17	2.1303e-17	2.1303e-17	2.1303e-17
14	-0.0089	-8.5815e-04	-6.4249e-06	-3.5214e-10	3.0547e-17	-4.0366e-17	1.5694e-17	1.5694e-17	1.5694e-17	1.5694e-17
15	-0.0090	-8.6904e-04	-6.5032e-06	-3.5639e-10	3.5651e-17	-3.2930e-17	2.2260e-17	2.2260e-17	2.2260e-17	2.2260e-17
16	-0.0091	-8.8388e-04	-6.6111e-06	-3.6227e-10	2.0764e-17	7.0417e-18	7.7136e-18	7.7136e-18	7.7136e-18	7.7136e-18
17	-0.0094	-9.0988e-04	-6.8030e-06	-3.7274e-10	-1.5697e-17	-3.0843e-17	2.2435e-17	2.2435e-17	2.2435e-17	2.2435e-17
18	-0.0092	-8.9095e-04	-6.6690e-06	-3.6547e-10	-1.5497e-17	-3.2101e-17	-3.4362e-17	-3.4362e-17	-3.4362e-17	-3.4362e-17
19	-0.0090	-8.8281e-04	-6.6197e-06	-3.6292e-10	3.6379e-17	2.2928e-17	2.2823e-17	2.2823e-17	2.2823e-17	2.2823e-17
20	-0.0091	-8.9067e-04	-6.6683e-06	-3.6546e-10	-1.7104e-17	-3.2577e-17	-2.9465e-17	-2.9465e-17	-2.9465e-17	-2.9465e-17
21	-0.0094	-9.0952e-04	-6.8021e-06	-3.7272e-10	3.7227e-17	-3.1581e-17	2.4734e-17	2.4734e-17	2.4734e-17	2.4734e-17
22	-0.0046	-4.4411e-04	-3.3263e-06	-1.8231e-10	-6.2861e-18	-1.4016e-17	-1.4563e-17	-1.4563e-17	-1.4563e-17	-1.4563e-17
23	-0.0045	-4.4274e-04	-3.3180e-06	-1.8189e-10	3.7877e-17	3.0720e-17	3.0756e-17	3.0756e-17	3.0756e-17	3.0756e-17
24	-0.0046	-4.4404e-04	-3.3261e-06	-1.8231e-10	-6.6879e-18	-1.4134e-17	-1.3339e-17	-1.3339e-17	-1.3339e-17	-1.3339e-17