

■教育論文■

PN シリコンダイオードのデバイスシミュレーションと 電流測定値の比較

青木 孝^{1,2}

Comparison between Device Simulation and Measurements in PN Silicon Diode

Takashi Aoki^{1,2}

¹ Department of Mathematics and Physics, Faculty of Science, Kanagawa University, Hiratsuka City, Kanagawa 259-1293, Japan

² To whom correspondence should be addressed. E-mail: u17aok@kanagawa-u.ac.jp

Abstract: Measurements of electric current were simulated by device simulation (CV method) in PN silicon-diode. As a result of device simulation, it was noted that an analytical solution by depletion approximation (with step junction) showed good approximation for measurements of electric current. The physical understanding of measurements of electric current was clarified by device simulation.

Keywords: device simulation, PN-junction silicon-diode, CV method, depletion, breakdown

序論

物理学実験 I の 1 テーマに、岩佐泉非常勤講師 (神奈川県大学理学部) が担当する、PN 接合シリコンダイオードの順方向バイアス時における電流 I_d (mA)-電圧 V (V) 特性を調べる実験がある。電流値の測定結果の 1 例は、Table 1 となる。

Table 1. Electric current I_d (mA) versus V (V)

V	0.35	0.50	0.54	0.59	0.63	0.67
I_d	0.01	0.20	0.50	2.00	5.00	10.00

Table 1 のように、シリコンダイオードでは、電圧 $V=0.6$ (V) 付近から急に電流が流れだす。次に、逆バイアスでは電流が流れないことを確認し、PN 接合ダイオードの整流特性を実感することが実験の目的となっている。しかしそれだけの実験で終わらずに、さらに学生に対して半導体物理の理解を深める教育はできないものかと、本田充彦特別助教 (神奈川県大学理学部) と話し合った。そのための一考として、PN 接合の P 型と N 型半導体のドーピング濃度分布を階段接合として近似すれば、解析的にポアソン方程式を解いて電位分布 ψ (V) が求まり、それを使って、電子 n と正孔 p の分布を解析的に表わすことができるが、それだけでは接合半導体物理の理解としては乏しいと考えた。

幸い報告者は、村田健郎研究室 (神奈川県大学理学部) において、n-MOS デバイスシミュレーションを 1 から作成した経験があり¹⁾、きっとデバイスとしては単純な PN 接合シリコンダイオードのデバイスシミュレータを作成すれば、求めたい電流値 I_d はもちろん、電位 ψ 、キャリア濃度 n, p などの物理量も数値的に随時把握できるうえ、その作成過程および結果を見ることによって、PN 接合シリコンダイオードの動作について、さらなる学生への理解の手助けが提供できると考えたわけである。村田は、数値シミュレーションを次の 3 段階から見よと言う²⁾。

- (1) 現象のモデル化：偏微分方程式の問題に表現
- (2) 上記問題を解く：離散化と数値解法 (ソルバ含む)
- (3) 得られた結果を目的に照らして評価する：モデルの当否、解法の当否を含む

そしてこれら一連のプロセスが完結して、はじめて数値シミュレーションも完結するという特徴を持つ。これらの教えを、PN 接合シリコンダイオードのデバイスシミュレーション作成を通して学生へも伝えられ、追体験してもらえることも期待した。また、今まで、PN 接合シリコンダイオードのデバイスシミュレータをわざわざ作成した文献を、報告者が見

たことがないという事実も動機となった。さらに、いわゆるツェナーダイオードの降伏特性を計算するシミュレーションは、デバイスシミュレーションの利点を体感できる良い例であることを示す。なお、シミュレーションの概要を知ることは、さらなる半導体物理の理解を深めると信じるのでデバイスシミュレーションの実装についても論ずる。

方法

PN 接合シリコンダイオードの物理

物理学実験 I で実測する電流-電圧特性に至る半導体物理を理解するために、PN 接合のドーピング濃度が階段状に分布すると仮定し空乏層近似を使った解析解と、正確にポアソン方程式および電子 n と正孔 p の移流拡散方程式を数値的に解く、CV 法 (離散化法) による数値シミュレーション解を比較する。本報告では、実験測定値と、これらの PN 階段接合を仮定し空乏層近似を使った解析解と、CV 法による数値シミュレーション解が、ほぼ一致することを示すことによって、PN 階段接合を仮定した空乏層近似がかなり良い近似であることを明確にする。

PN 接合ダイオードを解く、ドリフト拡散モデルでは、電位 ψ のポアソン方程式 1 本 :

$$(0.1) \text{div}[-\varepsilon \nabla \psi] = e(p - n - N_a + N_d) = \rho$$

ここに、 n は電子密度、 p は正孔密度、 e は電荷定数 (ρ : 全電荷密度)、 N_a はアクセプタ濃度 (P 型)、 N_d はドナー濃度 (N 型)、 ε は誘電率で場所の関数。

と、ボルツマン輸送方程式に基づく各キャリア濃度のバランス方程式 2 本 (これはキャリア濃度の移流拡散方程式になっており、電流連続の方程式と呼ばれる) :

$$(0.2) \text{div}[-D_n \nabla n + (\mu_n \nabla \psi)n] = GR,$$

$$\mathbf{J}_n = -e[-D_n \nabla n + (\mu_n \nabla \psi)n]$$

$$(0.3) \text{div}[-D_p \nabla p - (\mu_p \nabla \psi)p] = GR,$$

$$\mathbf{J}_p = +e[-D_p \nabla p - (\mu_p \nabla \psi)p]$$

ここに、 \mathbf{J}_n 、 \mathbf{J}_p は、それぞれ電子と正孔の電流密度を表わす。 $\mu_{n,p}$ は電子、正孔のモビリティで、場所と電位の関数であり様々なモデルが提案されている。 $D_{n,p}$ は電子、正孔の拡散係数、 GR はキャリア生成結合項。

の合計 3 本を連立させて解く。ここで、電圧 $V=0.6(V)$ 近くの PN 接合シリコンダイオードの電流-電圧特性を見る場合には $GR=0$ でも良い。電流

値 Id の差にして 1 割程度である。むしろ、この GR 項は、逆バイアス時のアバランシェ効果をシミュレーションするために必須である。 $GR=0$ では、逆電流は流れず整流作用しかシミュレーションできない。 GR 項のモデルと効用は、結果と討論に示す。

$GR=0$ とすると、電子と正孔の移流拡散方程式 (0.2)(0.3) は、

$$(0.4) \text{div}[-D_n \nabla n + (\mu_n \nabla \psi)n] = 0$$

$$(0.5) \text{div}[-D_p \nabla p - (\mu_p \nabla \psi)p] = 0$$

となる。これらの式の電子濃度 n 、正孔濃度 p は、電子、正孔の擬似フェルミポテンシャル ϕ_n 、 ϕ_p を使って、

$$(0.6) n = n_i \cdot e^{\frac{e}{k_B T}(\psi - \phi_n)}$$

$$(0.7) p = n_i \cdot e^{\frac{e}{k_B T}(\phi_p - \psi)}$$

と表すことがある。ここで、 n_i は真性半導体のキャリア濃度で、 $n_i = 1.5 \times 10^{10}(\text{cm}^{-3})$ 、 e : 素電荷、 k_B : ボルツマン定数、 T : 温度 (K) とする。 $T=300(K)$ の場合には、 $e/k_B T=38.68(\text{V}^{-1})$ となる。式 (0.6)(0.7) は、疑似フェルミポテンシャルの定義式と考えるべきものであり、移流拡散方程式 (0.4)(0.5) の解である。

さて、バイアスのない平衡状態では、疑似フェルミポテンシャルは、フェルミポテンシャル ϕ に一致し場所に寄らず一定で、 $\phi_n = \phi_p = \phi = 0$ としてよく、この時、電流は流れず、 $\mathbf{J}_n = \mathbf{J}_p = 0$ となる。式 (0.4) に電子 n の式 (0.6) を代入すれば、

$$(0.8) \text{div} \left[-D_n n \cdot \frac{e}{k_B T} \nabla \psi + (\mu_n \nabla \psi)n \right] = 0$$

となる。 $\mathbf{J}_n = 0$ となるためには、

$$-D_n n \cdot \frac{e}{k_B T} \nabla \psi + (\mu_n \nabla \psi)n = 0$$

でなければならない。したがって、正孔 p の場合も同様に考え、まとめて、

$$(0.9) \frac{\mu_{n,p}}{D_{n,p}} = \frac{e}{k_B T_{n,p}} = \nu_{n,p} \quad (\text{V}^{-1}),$$

$$\left(T_{n,p} = \frac{11610.145}{\nu_{n,p}} (\text{K}) \right)$$

の関係が成り立たねばならない。式 (0.9) は、モビリティ $\mu_{n,p}$ と拡散係数 $D_{n,p}$ の比が一定で、その一定値はキャリア温度 $T_{n,p}$ に依存することを示し、Einstein の関係と呼ばれる。このようにバイアスがない場合には、 $-D_n \nabla n$ のキャリア濃度 n の拡散項とキャリア濃度 n に比例する $(\mu_n \nabla \psi)n$ のドリフト項 (移流項) が、Einstein の関係により拮抗して

つり合い、キャリア電流が流れない。キャリア電流は、疑似フェルミポテンシャル ϕ_n, ϕ_p を使うと、式 (0.2)(0.3) の $\mathbf{J}_n, \mathbf{J}_p$ に式 (0.6)(0.7) を代入して、

$$\mathbf{J}_n = -e\mu_n n \nabla \phi_n, \quad \mathbf{J}_p = -e\mu_p p \nabla \phi_p$$

と表わすことができ、疑似フェルミポテンシャルの勾配により、バイアス印加時には電流が流れる。

また、半導体で重要な役割を持つ $n \cdot p$ の積は、式 (0.6)(0.7) から次式となる。

$$(0.10) \quad n \cdot p = n_i^2 \cdot e^{\frac{e}{k_B T} (\phi_p - \phi_n)}$$

バイアスがない場合には、 $\phi_p = \phi_n = 0$ として、

$$(0.11) \quad n \cdot p = n_i^2$$

となる。真性半導体では、 $n=p=n_i$ であったので、式 (0.11) はキャリアの保存則 (電気的中性条件) を表わす式になっている。

バイアスがない場合の電極境界条件を考える。今、PN 接合シリコンダイオードがあり、いわゆる階段接合を仮定し、左側の P 型半導体には一様にアクセプタ N_a がドーピングされ、右側の N 型半導体には一様にドナー N_d がドーピングされているとする。両側の電極境界が、オーミックコンタクトであるとすれば、その電極境界でポアソン方程式 (0.1) の右辺の電荷密度が 0 である必要から、

$$(0.12) \quad p_{oc} - n_{oc} - N_a + N_d = 0, \quad p_{oc} \cdot n_{oc} = n_i^2$$

が成立しなければならない。式 (0.12) の 2 式を解いて、

$$(0.13) \quad n_{oc} = \frac{(N_d - N_a) \pm \sqrt{(N_d - N_a)^2 + 4n_i^2}}{2}$$

$$(0.14) \quad p_{oc} = \frac{-(N_d - N_a) \pm \sqrt{(N_d - N_a)^2 + 4n_i^2}}{2}$$

となる。P 側電極では $N_d = 0, N_a = N_a$ 、N 側電極では $N_a = 0, N_d = N_d$ であると考えれば、P 側電極 (左側 L) で、

$$p_{Poc} = \frac{N_a \pm \sqrt{N_a^2 + 4n_i^2}}{2} \simeq N_a, \quad n_{Poc} = \frac{n_i^2}{p_{Poc}}$$

一方、N 側電極 (右側 R) では次式となる。

$$n_{Noc} = \frac{N_d \pm \sqrt{N_d^2 + 4n_i^2}}{2} \simeq N_d, \quad p_{Noc} = \frac{n_i^2}{n_{Noc}}$$

バイアスがない場合なので、 $\phi_n = \phi_p = 0$ として、式 (0.6)(0.7) を逆に解けば、

$$(0.15) \quad \psi_N = \frac{k_B T}{e} \cdot \ln \left(\frac{n}{n_i} \right) \quad (\text{N 側})$$

$$(0.16) \quad \psi_P = -\frac{k_B T}{e} \cdot \ln \left(\frac{p}{n_i} \right) \quad (\text{P 側})$$

となる。したがって、P 側電極で $p = p_{Poc} \simeq N_a$ とすれば、 $N_a = 0.58 \cdot 10^{18} (\text{cm}^{-3})$ の時、

$$(0.17) \quad \psi_P = -\frac{k_B T}{e} \cdot \ln \left(\frac{N_a}{n_i} \right) = -0.452 \text{ (V)}$$

となる。一方、N 側電極で $n = n_{Noc} \simeq N_d$ とすれば、 $N_d = 7.5 \cdot 10^{19} (\text{cm}^{-3})$ の時、

$$(0.18) \quad \psi_N = \frac{k_B T}{e} \cdot \ln \left(\frac{N_d}{n_i} \right) = 0.578 \text{ (V)}$$

となり、バイアスなしの電極における境界条件 (n_{oc}, p_{oc}, ψ) が Table 2 のように決定する。

Table 2. Boundary condition of $V=0$

Side	$n_{oc} (\text{cm}^{-3})$	$p_{oc} (\text{cm}^{-3})$	$\psi (\text{V})$
P(L)	$388 \left(\frac{n_i^2}{N_a} \right)$	$0.58 \cdot 10^{18}$	$-0.452 (\psi_P)$
N(R)	$7.5 \cdot 10^{19}$	$3.0 \left(\frac{n_i^2}{N_d} \right)$	$0.578 (\psi_N)$

このように、バイアス電圧がかかっていなくても、P 側境界は $-0.452 (\text{V})$ 、N 側境界は $0.578 (\text{V})$ の電位 ψ を持ち、N 側から P 側への電位勾配 (電場) が存在する。この電位勾配が大きい所は、キャリアがほとんど存在しないと仮定し空乏層と呼ばれ、ドーピングが高濃度の N 側は極めて幅が狭く、P 側にだけにできる。この時、ビルトイン電圧: $\phi_S = \psi_N - \psi_P$ は $1.03 (\text{V})$ となる。順バイアスでは、このビルトイン電圧が減る方向に電圧 V をかける。P 側半導体 (左) に正電圧 $V (V > 0)$ をかける順バイアスでは、P 側電極の境界電位 ψ_P を $\psi_P^V = \psi_P + V$ とする。この時、N 側電極の境界電位の方を $\psi_N^V = \psi_N - V$ としても同じ事である。後で述べるが、数値シミュレーション上では、この後者の高濃度ドーピング側の N 側電極の境界条件をバイアスした方 (ψ_N^V) が、収束計算時間を前者に比べ 2 割程度短くできる。

また、従来の、Einstein の関係式 (0.9) におけるキャリア温度 T_n, T_p を、格子温度 T_l (一定) とする簡易的なドリフト拡散モデルでは、ホットキャリアのシミュレーションができないことが分かっており、拡張したドリフト拡散モデルでは、Einstein の関係式 (0.9) がキャリア温度 T_n, T_p の関数だとして局所的な場で Einstein の関係式 (0.9) が成り立つとして解く。この時、拡張されたドリフト拡散モデルの 1 つ、Hansch と Selberherr のモデル (HS)³⁾ では、このキャリア温度 T_n, T_p を、モビリティ $\mu_{n,p}$ のモデル式 (後述の式 (0.22)(0.23) を参照のこと) を逆に解いたような簡単な次式で与えることでホットキャ

リア効果を簡易的に組み込む。

$$(0.19) \nu_{n,p} = \nu_{T0} \left[1 + \gamma_T \left(\frac{\mu_{n,p}^{LI}}{\mu_{n,p}^{LIF}} - 1 \right) \right]^{-1}$$

$$= \frac{e}{k_B T_{n,p}}, \nu_{T0} \equiv \frac{e}{k_B T_l} = \frac{e}{k_B (300K)} = 38.68$$

ここで、 γ_T は、村田と報告者が開発したシミュレーションモデル：(HS) $_{\beta}$ に導入したもので⁴⁾、最大電子温度： T_{nmax} 値のチューニングパラメータとし、次の手順に依り決める。電子温度が最大値 T_{nmax} となる PN 接合面において、その場所のホットエレクトロンの電子温度 T_n と接合面に垂直 (x 方向) な電場 E_x は、

$$(0.20) k_B T_n = e E_x \cdot l$$

との関係で結びつくと考える。ここで、 l は電子の平均自由行程 ($l = 0.0078(\mu\text{m})$) とする。この式 (0.20) から計算した電子温度 T_n^C :

$$(0.21) T_n^C \equiv \frac{e E_x \cdot l}{k_B}, E_x \text{はシミュレーション値}$$

が、 γ_T を上げて (その時 T_n も上がる) シミュレーションした PN 接合面での T_{nmax} 値と一致する γ_T をチューニング値と決めることにする。Fig.1では、PN 接合面でのシミュレーション結果 T_{nmax} と、 E_x 値にシミュレーション結果を使い計算した T_n^C ($\equiv \frac{e E_x \cdot l}{k_B}$) がクロスする点の横軸 γ_T の値：0.190がチューニング値となる。この Fig.1 は、順バイアス $V=0.6(V)$ とした場合の結果が示してあるが、バイアスがない場合でも同じ γ_T 値になる。

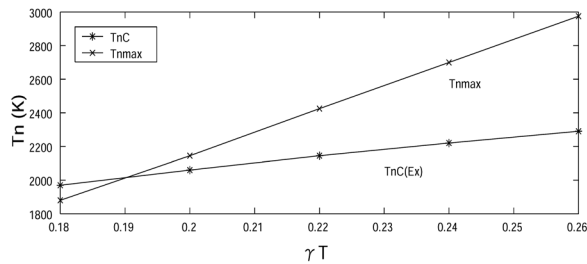


Fig.1. Tuning of parameter γ_T .

また、電子と正孔の電流連続の方程式 (0.2)(0.3) に現れる $\mu_{n,p}$ は、電子 n 、正孔 p のモビリティで、ここでは、電場依存性を考慮したモビリティ： $\mu_{n,p} = \mu_{n,p}^{LIF}$ として、次の計算モデルを使う。

[1] 電場依存性 ($|\mathbf{E}| = |-\nabla\psi|$)

$$(0.22) \mu_n^{LIF} = \frac{2\mu_n^{LI}}{1 + \sqrt{1 + (2\mu_n^{LI} \cdot |\mathbf{E}| / v_n^{sat})^2}}$$

(cm^2/Vs), $v_n^{sat} = 0.90 \cdot 10^7$ (cm/s)

$$(0.23) \mu_p^{LIF} = \frac{\mu_p^{LI}}{1 + (\mu_p^{LI} \cdot |\mathbf{E}| / v_p^{sat})}$$

(cm^2/Vs), $v_p^{sat} = 0.7982 \cdot 10^7$ (cm/s)

上の式 (0.22)(0.23) に現れる $\mu_{n,p}^{LI}$ は、不純物濃度依存性を考慮した次のモデルである。

[2] 不純物濃度依存性 (N_a, N_d : アクセプタ, ドナーのドーピング量)

$$(0.24) \mu_{n,p}^{LI} = \mu_{n,p}^{min} + \frac{\mu_{n,p}^L - \mu_{n,p}^{min}}{1 + (\frac{C_I}{C_p^{ref}})^{0.72}}$$

$$C_I = N_a + N_d, \text{ここで}, \mu_n^L = 1430(\text{cm}^2/\text{Vs}),$$

$$\mu_p^L = 460(\text{cm}^2/\text{Vs}), \mu_n^{min} = 80(\text{cm}^2/\text{Vs}),$$

$$\mu_p^{min} = 45(\text{cm}^2/\text{Vs}), C_p^{ref} = 1.12 \cdot 10^{17}(\text{cm}^{-3}),$$

$$C_p^{ref} = 2.23 \cdot 10^{17}(\text{cm}^{-3})$$

式 (0.19) と式 (0.22)(0.23) は、それぞれ本来は Boltzmann 輸送方程式から導いたキャリアのエネルギーバランス方程式 ($T_{n,p}$ を解く) と、運動量バランス方程式 (ドリフト速度 \mathbf{v}_d から $\mu_{n,p}$ を解く) を数的に解くべきであるが、CPU 時間の負荷を考慮して、それに代わるものを簡便な形で $T_{n,p}$ と $\mu_{n,p}$ を関係づけて、シミュレーションに取り入れたという位置づけになる。

このとき楽をしないで、 $\mu_{n,p}$ はモデルのまま、電子温度 T_n のバランス方程式だけは数的に解くモデルは、エネルギー輸送モデルと呼ばれ、拡張されたドリフト拡散モデルよりも 1 本 (合計 4 本) 多く非線形方程式を解くことになり、CPU 時間の負荷が約 3 倍増える。しかし、エネルギー輸送モデルは、n-MOS シミュレーションにおいて、実際に近い相互コンダクタンス g_m の計算値に改善し、さらに、ホットエレクトロンの速度オーバーシュート現象も再現できる等の利点がある。この時、モビリティ計算モデル μ_n は、電場依存モデル式 (0.22) の中で、電子飽和速度： v_n^{sat} により速度が飽和するようにしている。拡張されたドリフト拡散モデルでは、 $v_n^{sat} = 0.90 \cdot 10^7$ (cm/s) を超える速度を持ってないが、エネルギー輸送モデルでは、飽和させる $\mathbf{v}_d = \mu_n \mathbf{E}$ ではなく、 $\mathbf{v}_d = \frac{\mathbf{J}_n}{en}$ として見ると、 v_n^{sat} を超えるドリフト速度： \mathbf{v}_d を持つことができる。

電子のエネルギーバランス方程式は、電子温度 T_n を、電圧 (V) で表わした U_{Tn} :

$$(0.25) U_{Tn} \equiv \frac{1}{\nu_n} = \frac{k_B T_n}{e} = \left(\frac{D_n}{\mu_n} \right)$$

を解く方程式として次式となる。ここでは、方程式を示すに留めるが、 U_{Tn} に関する非線形の移流拡散方程式となり、数値的に解くことが難しい。

$$(0.26) \operatorname{div} \left[-\frac{5}{2} n \mu_n^{LIF} U_{Tn} \nabla U_{Tn} + \frac{5}{2} \mathbf{J}_n^D U_{Tn} \right] = Ru \left(\mathbf{J}_n^D \cdot (\nabla \psi) - \frac{3}{2} n \cdot \nu_\omega (U_{Tn} - U_{T0}) \right)$$

$$U_{T0} \equiv \frac{1}{\nu_{T0}}, \quad \mathbf{J}_n^D \equiv n \mathbf{v}_d = \frac{\mathbf{J}_n}{-e}$$

Ru は、電子温度 U_{Tn} を式 (0.26) のように厳密に解かず、式 (0.19) で与える拡張したドリフト拡散モデル (HS) $_{\beta}$ におけるパラメータ γ_T に相当する。したがって、 γ_T 同様に、電子温度 T_n をチューニングするパラメータとして導入した。パラメータ Ru の範囲は、 $0.0 \leq Ru \leq 1.0$ であり、 $Ru = 0.0$ では、電子温度 $T_n = 300(\text{K})$ となる。 Ru は大きくしていくと、後述する離散化して得る行列方程式 ($\mathbf{A}\mathbf{U}=\mathbf{F}$) の行列 \mathbf{A} の対角項 a_0 が負 ($a_0 < 0$) になり、ソルバ: BCGSTAB が解けなくなる。「行列 \mathbf{A} が正則である」ことと、「軸選択なしのガウス消去法で解ける」ことは同義であり、「行列 \mathbf{A} が正則」であるためには、「行列 \mathbf{A} が行対角優位 ($a_0 > 0$)」でなくてはならない。この時、離散化して得た行列方程式が解ける最大のパラメータ Ru 値を、 Ru_{max} 値として、 Ru のチューニング値 ($Ru = Ru_{max}$) とする。

ν_ω はエネルギー緩和時間 τ_ω の逆数で、一定値ではエネルギーバランス方程式 (0.26) の数値解が収束しない。したがって、 $\nu_\omega(U_{Tn})$ を電子温度 U_{Tn} の関数にすることが不可欠であり、文献⁵⁾ の p.164 にあるモンテカルロ計算から得られた結果に則して、

$$(0.27) \nu_\omega(U_{Tn}) = \nu_{\omega_0} \left(\frac{20 \left(\frac{3}{2} U_{Tn}\right)^8}{1 + 20 \left(\frac{3}{2} U_{Tn}\right)^8} \right),$$

$$\nu_{\omega_0} = \frac{1}{0.4} \text{ (ps}^{-1}\text{)}$$

と設定する。式 (0.27) により、 $\nu_\omega(U_{Tn})$ は、一定値: $\nu_{\omega_0} = \frac{1}{0.4}(\text{ps}^{-1})$ から、 $U_{Tn} = 0.067 \text{ (eV)}$ ($\approx 773 \text{ (K)}$) を境に、 $U_{Tn} \rightarrow 0$ に向けて、 $\nu_\omega(U_{Tn}) \rightarrow 0$ に近づくようにし向ける。

バイアスなし階段接合の空乏近似解析

まず、バイアスなしの場合を考える。N型半導体のドーピング濃度を一様に $N_d(\text{cm}^{-3})$ とし、P型半導体のドーピング濃度を一様に $N_a(\text{cm}^{-3})$ とする。今、 $N_d \gg N_a$ とすると、移流拡散方程式 (0.2)(0.3) にしたがってキャリアが移動した後の空乏層の幅は、Fig.2のようにPN接合面を横軸 $x = 0$ とすれば、N型側で x_n 、P型側で $-x_p$ となり、 $x_n \ll x_p$ である。

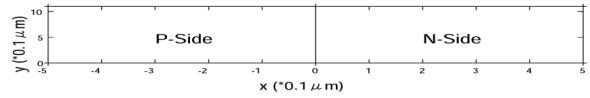


Fig.2. PN-junction silicon diode.

この空乏層内でキャリアがない(実際は少しある)と仮定するのが空乏近似で、この領域内では、イオン化した原子: N_d^+ , N_a^- だけが電荷となり、空乏層内だけに電荷密度 ρ があるという次の近似である。

$$\rho = N_a^- \quad (-x_p \leq x \leq 0), \quad \rho = N_d^+ \quad (0 \leq x \leq x_n)$$

一方、空乏層の外側は、階段接合を仮定するので、

$$(0.28) \rho = p_P^+ - N_a^- = 0 \quad (x \leq -x_p),$$

$$\rho = -n_N^- + N_d^+ = 0 \quad (x_n \leq x)$$

と見る。式 (0.2)(0.3) の拡散電流とドリフト電流がバランスして電流が流れないためには、全電荷 = 0:

$$(0.29) N_d^+ \cdot x_n = N_a^- \cdot x_p$$

でなければならない。N側の空乏層の外側で、式 (0.6) と式 (0.28) から、

$$(0.30) N_d = n_N = n_i \cdot e^{\frac{e}{k_B T} \psi_N} \quad (x_n \leq x)$$

とおける。同様に、P側の空乏層の外側で、式 (0.7) と式 (0.28) から、

$$(0.31) N_a = p_P = n_i \cdot e^{\frac{e}{k_B T} (-\psi_P)} \quad (x \leq -x_p)$$

となる。上の2式 (0.30)(0.31) を逆に解けば、電極側のオーミック境界条件は、式 (0.15)(0.16) と同様に決まり、空乏層の外側の電位 $\psi(x)$ は、一定値として次のように求まる。

$$(0.32) \psi(x) = \psi_N = \frac{k_B T}{e} \cdot \ln \left(\frac{N_d}{n_i} \right) > 0 \quad (x_n \leq x)$$

$$(0.33) \psi(x) = \psi_P = -\frac{k_B T}{e} \cdot \ln \left(\frac{N_a}{n_i} \right) < 0 \quad (x \leq -x_p)$$

ドーピング濃度が高ければ、ビルトイン電圧: $\phi_S = \psi_N - \psi_P$ も大きくなる。したがって、バイアスがなくても、この電位勾配によって電場: $\mathbf{E} = -\nabla \psi$ は、N側からP側へ向かう。電子 n については、式 (0.8) より、

$$(0.34) -D_n \nabla n + (\mu_n \nabla \psi) n = 0$$

であり、 $-D_n \nabla n$ の拡散電流は、N側からP側へ、一方、 $(\mu_n \nabla \psi) n$ のドリフト電流は、P側からN側へ向かい、この2つがバランスして電流は流れない。

また、ポアソン方程式 (0.1) から、N 側の空乏層内 ($0 \leq x \leq x_n$) で、

$$(0.35) \operatorname{div}[-\varepsilon \nabla \psi] = e N_d^+$$

P 側の空乏層内 ($-x_p \leq x \leq 0$) では、

$$(0.36) \operatorname{div}[-\varepsilon \nabla \psi] = -e N_a^-$$

となり、これらを解けば、空乏層内における電位 $\psi(x)$ 、電場 $\mathbf{E}(= -\nabla \psi(x))$ が解析的に求まる。式 (0.35)(0.36) を一階積分すれば、電場 $\mathbf{E}(x)$ が決まる。電場の連続性により、

$$\left. \frac{d\psi(x)}{dx} \right|_{x=+0} = \left. \frac{d\psi(x)}{dx} \right|_{x=-0} \text{ から、}$$

$$(0.37) N_d x_n = N_a x_p \quad (: \text{同式 (0.29)})$$

が出る。空乏層境界で、電場 $\mathbf{E}(x) = 0$ である必要により、

$$\left. \frac{d\psi(x)}{dx} \right|_{x=-x_p} = 0, \quad \left. \frac{d\psi(x)}{dx} \right|_{x=x_n} = 0 \text{ から、}$$

$$(0.38) -E(x) = \frac{d\psi(x)}{dx} = \frac{eN_a}{\varepsilon} x + \frac{eN_a}{\varepsilon} x_p \quad (\text{P 側: } -x_p \leq x \leq 0)$$

$$(0.39) -E(x) = \frac{d\psi(x)}{dx} = -\frac{eN_d}{\varepsilon} x + \frac{eN_d}{\varepsilon} x_n \quad (\text{N 側: } 0 \leq x \leq x_n)$$

さらに、もう一階積分すれば、電位 $\psi(x)$ の解析解が求まる。 $\psi(-x_p) = \psi_P < 0$ 、 $\psi(x_n) = \psi_N > 0$ より、次式となる。

$$(0.40) \psi(x) = \frac{eN_a}{2\varepsilon} x^2 + \frac{eN_a}{\varepsilon} x_p x + \frac{eN_a}{2\varepsilon} x_p^2 + \psi_P \quad (-x_p \leq x \leq 0)$$

$$(0.41) \psi(x) = -\frac{eN_d}{2\varepsilon} x^2 + \frac{eN_d}{\varepsilon} x_n x + \frac{eN_d}{2\varepsilon} x_n^2 + \psi_N \quad (0 \leq x \leq x_n)$$

$\psi(+0) = \psi(-0)$ の必要から、

$$(0.42) -\frac{eN_d}{2\varepsilon} x_n^2 + \psi_N = \frac{eN_a}{2\varepsilon} x_p^2 + \psi_P$$

となり、式 (0.37) と式 (0.42) を解いて、空乏層の幅 x_n, x_p が決まる。

$$(0.43) x_n = \sqrt{\frac{2\varepsilon(\psi_N - \psi_P)N_a}{e(N_a + N_d)N_d}}$$

$$(0.44) x_p = \sqrt{\frac{2\varepsilon(\psi_N - \psi_P)N_d}{e(N_a + N_d)N_a}} \quad W \equiv x_n + x_p$$

となる。 $N_d \gg N_a$ ならば、N 側は空乏層が非常に薄く、

$$(0.45) x_n \simeq 0, x_p = \sqrt{\frac{2\varepsilon(\psi_N - \psi_P)}{eN_a}}, \psi(+0) \simeq \psi_N$$

と近似できる。この電位 $\psi(x)$ の式 (0.40)(0.41) を使って、空乏層内 $-x_p \leq x \leq x_n$ のキャリア密度が次式で計算できる。

$$(0.46) n(x) = n_i \cdot e^{\frac{e}{k_B T}(\psi(x))}$$

$$(0.47) p(x) = n_i \cdot e^{\frac{e}{k_B T}(-\psi(x))}$$

これらの式 (0.46)(0.47) から、 $N_d \gg N_a$ ならば、 $x = 0$ で $\psi(0) \simeq \psi_N \simeq \psi(x_n)$ なので、

$$(0.48) n(0) = n_i \cdot e^{\frac{e}{k_B T}(\psi_N)} = N_d,$$

$$p(0) = n_i \cdot e^{\frac{e}{k_B T}(-\psi_N)} = \frac{n_i^2}{N_d}$$

となる。P 側の $x = -x_p$ では、

$$(0.49) n(-x_p) = n_i \cdot e^{\frac{e}{k_B T}(\psi_P)} = \frac{n_i^2}{N_a}, p(-x_p) = N_a$$

となっている ($\psi_P < 0$)。以上、バイアスなしの階段接合を仮定した空乏近似においては、パラメータはドーピング濃度 N_d, N_a しかなく、その濃度分布が空乏層における電荷分布を決め、ポアソン方程式 (0.1) を満足するように電位勾配：ビルトイン電圧を生ずる。パラメータの N_d, N_a から、物理量： $\psi(x), E(x), x_n, -x_p, n(x), p(x)$ が解析的に決まる。

バイアスあり階段接合の空乏近似解析解

次に、バイアス V を印加した場合を考える。順バイアスの場合には、N 側の電極電位 ψ_N が $\psi_N^V = \psi_N - V$ ($V > 0$) となる。このバイアス印加により、電位 ψ の式 (0.41) や空乏層幅 x_n, x_p の式 (0.43)(0.44) に出てくる ψ_N を $\psi_N^V = \psi_N - V$ に置きかえるだけでよい。ビルトイン電圧 ϕ_S は、 $\phi_S^V = \phi_S - V = \psi_N - \psi_P - V$ となり、順バイアスでは、電圧 V だけ狭まることにより、(方向は変わらず) 電場 $E(x)$ が小さくなり、ドリフト電流は減る。また、 $N_d \gg N_a$ ならば、拡散電流は元々の電子電流に加え、バイアスをかけたことにより、P 側空乏層の外側 ($x < -x_p$) の少数キャリアである電子密度 n が指数関数的に増え、この分の拡散電流が加わる。結果として、ドリフト電流より拡散電流の方が大きくなり、拮抗が崩れ電流が流れる。この $N_d \gg N_a$ の場合には、順バイアスにより生じた P 型内の電子少数キャリア n の拡散電流が主になる。空乏層幅 $W = x_n + x_p$ も、順バイアス

印加により狭まる。以上、順バイアス $V(> 0)$ で、 $N_d \gg N_a$ の場合を整理すれば、次式となる。

$$(0.50) \quad x_n \simeq 0, \quad x_p = \sqrt{\frac{2\varepsilon(\psi_N - \psi_P - V)}{eN_a}}$$

$$(0.51) \quad \psi(+0) \simeq \psi_N^V = \psi(x_n) = \psi_N - V$$

$$\psi(x) = \frac{eN_a}{2\varepsilon}x^2 + \frac{eN_a}{\varepsilon}x_p x + \frac{eN_a}{2\varepsilon}x_p^2 + \psi_P$$

$$(-x_p \leq x \leq 0)$$

$$(0.52) \quad -E(x) = \frac{d\psi(x)}{dx} = \frac{eN_a}{\varepsilon}x + \frac{eN_a}{\varepsilon}x_p$$

$$(-x_p \leq x \leq 0)$$

今、解析的に検討ができる範囲で、シミュレーションによる結果とは少し違うが、PN 階段接合ダイオードの動作を考える。ドーピング濃度 ($N_d \gg N_a$) を、

$$(0.53) \quad N_d = 7.5 \cdot 10^{19}(\text{cm}^{-3}),$$

$$N_a = 0.58 \cdot 10^{18}(\text{cm}^{-3})$$

とすると、P(左)側電極電位 ψ_P 、N(右)側電極電位 ψ_N 、バイアスなしビルトイン電圧： $\phi_S = \psi_N - \psi_P$ は、式 (0.17)(0.18) より、次のように計算できる。

$$(0.54) \quad \psi_P = -0.452(\text{V}), \quad \psi_N = 0.578(\text{V}),$$

$$\phi_S = 1.03(\text{V})$$

P 側と N 側の空乏層幅は、 $x_p \gg x_n$ となり、式 (0.43)(0.44) より次のように計算できる。

$$(0.55) \quad x_p = 4.81 \cdot 10^{-6}(\text{cm}), \quad x_n = 3.7 \cdot 10^{-8}(\text{cm})$$

P 型領域(左)の $x = -x_p$ での、正孔 p と電子 n のキャリア密度をそれぞれ、 p_P, n_P とすると、

$$(0.56) \quad p(-x_p) = p_P \simeq N_a = 0.58 \cdot 10^{18}(\text{cm}^{-3}),$$

$$n(-x_p) = n_P \simeq \frac{n_i^2}{p_P} = 3.88 \cdot 10^2(\text{cm}^{-3})$$

であり、P 型内電子キャリア n が少数キャリア ($n_P \ll p_P$) となる。同様に、N 型領域(右)の $x = x_n$ での、正孔 p と電子 n のキャリア密度をそれぞれ、 p_N, n_N とすると、

$$(0.57) \quad p(x_n) = p_N \simeq \frac{n_i^2}{n_N} = 0.3 \cdot 10^1(\text{cm}^{-3}),$$

$$n(x_n) = n_N \simeq N_d = 7.5 \cdot 10^{19}(\text{cm}^{-3})$$

であり、N 型内正孔キャリア p がもっとも少数キャリア ($n_P \gg p_N$) となる。ドーピング濃度が $N_d \gg N_a$ であるために、各側の少数キャリア密度が $n_P \gg p_N$ となることから、バイアス印加時に、主に P 側の少数

n_P キャリア拡散電流が主電流となる要因となる。順バイアス時には、本来は電流連続の方程式 (0.2) を解くべきであるが、解析時には、少数キャリアの拡散項： $[-D_n \nabla n]$ が主に働くことに留意する。電流連続の方程式 (0.4)(0.5) の解である、式 (0.6)(0.7) から、

$$(0.58) \quad n \cdot p = n_i^2 \cdot e^{\frac{e}{k_B T}(\phi_p - \phi_n)}$$

となる。バイアスがなければ、 $\phi_p - \phi_n = 0$ 。今、順バイアスをかけると、疑似フェルミポテンシャルに段差ができ、 $\phi_p - \phi_n = V (V > 0)$ となるので、

$$(0.59) \quad n \cdot p = n_i^2 \cdot e^{\frac{eV}{k_B T}}, \quad \phi_S^V = \phi_S - V$$

となり、 $n \cdot p$ の積は n_i^2 から指数関数的に増加する。バイアス $V = 0.6(\text{V})$ とすれば、ビルトイン電圧： ϕ_S^V は、 $1.03(\text{V})$ から、 $0.43(\text{V})$ ($= 1.03 - 0.6$) と狭まる。

順バイアス V が印加されると、式 (0.59) にしたがって、各側の少数キャリアが指数関数的に増加し、P 側のキャリア密度： p_P^V, n_P^V と、N 側のキャリア密度： p_N^V, n_N^V は、次のようになる。数値はバイアス $V = 0.6(\text{V})$ として計算してある。P 側は、

$$(0.60) \quad n_P^V \equiv n^V(-x_p) = n_P \cdot e^{\frac{eV}{k_B T}}$$

$$= 4.46 \cdot 10^{12}(\text{cm}^{-3}) \quad (\text{少数キャリア})$$

$$(0.61) \quad p_P^V \equiv p^V(-x_p) = p_P = N_a$$

$$= 0.58 \cdot 10^{18}(\text{cm}^{-3})$$

一方、N 側は、

$$(0.62) \quad n_N^V \equiv n^V(x_n) = n_N = N_d$$

$$= 7.5 \cdot 10^{19}(\text{cm}^{-3})$$

$$(0.63) \quad p_N^V \equiv p^V(x_n) = p_N \cdot e^{\frac{eV}{k_B T}}$$

$$= 3.45 \cdot 10^{10}(\text{cm}^{-3}) \quad (\text{少数キャリア})$$

となる。順バイアス印加後も、 $n_P^V \gg p_P^V$ となる。順バイアス印加による、少数キャリアの増加をまとめると Table 3 となる。

順バイアス $V = 0.6(\text{V})$ を印加することによって、フェルミレベルが動いて、P 側空乏層端 $x = -x_p$ において、元々の n_P の $e^{\frac{eV}{k_B T}}$ ($= 1.15 \cdot 10^{10}$) 倍の n_P^V 少数キャリア： $4.46 \cdot 10^{12}(\text{cm}^{-3})$ が誘起されて、P 側に注入され P 側電極へ向け拡散する。一方、N 側空乏層端 $x = x_n$ においても、元々の p_N の $e^{\frac{eV}{k_B T}}$ ($= 1.15 \cdot 10^{10}$) 倍の p_N^V 少数キャリア： $3.45 \cdot 10^{10}(\text{cm}^{-3})$ が誘起されて、N 側に注入され拡散する。この順バイアスによって指数関数的に誘起された少数キャリアによる拡散が、主電流となる (ϕ_S^V が狭まり電場 E が小さくなりドリフト電流： $(\nu_n \nabla \psi)n$ は減る)。

Table 3. Carrier(C) density(cm⁻³) by bias V

V(V)	C	P-side	N-side
0.0	n	3.88 · 10 ² (n _P)	7.5 · 10 ¹⁹ (n _N)
0.0	p	0.58 · 10 ¹⁸ (p _P)	0.3 · 10 ¹ (p _N)
0.6	n	4.46 · 10 ¹² (n _P ^V)	7.5 · 10 ¹⁹ (n _N ^V)
0.6	p	0.58 · 10 ¹⁸ (p _P ^V)	3.45 · 10 ¹⁰ (p _N ^V)

まず、P側の少数キャリア n_P の主電流となる拡散電流: $\mathbf{J}_{n_P} = -e[-D_n \nabla n]$ だけについて見る。∇n を、P側空乏層端 $x = -x_p$ において注入された少数キャリア n_P^V が、P型領域に入り込むほど正孔 p と再結合して、距離 x に比例して減少し、ほぼ拡散長 L_n で熱平衡状態における電子密度 n_P に一致すると考え、次のように差分近似する(文献⁶参照)。

$$(0.64) \nabla n = \frac{n_P^V - n_P}{L_n} = \frac{n_P}{L_n} [e^{\frac{eV}{k_B T}} - 1], \quad n_P = \frac{n_i^2}{N_a}$$

ここで、L_n は少数キャリア n_P の拡散長で、

$$(0.65) L_n = \sqrt{D_n \tau_n} = \sqrt{33.8 \times 10 \cdot 10^{-6}} \\ = 1.84 \cdot 10^{-2} (\text{cm})$$

$$D_n = \frac{k_B T}{e} \mu_n^{(L)} = 33.8 (\text{cm}^2/\text{s})$$

とする。上式で、τ_n は電子 n の寿命で τ_n = 10(μs) とし、μ_n^(L) には真性半導体における電子のモビリティ: μ_n^(L) = 1350(cm²/Vs) を使う。したがって、式(0.64)の第1項を使って、P側の少数キャリア n_P が担う電子拡散電流 J_{n_P} は、バイアス V = 0.6(V) の時、次のように計算できる。

$$(0.66) J_{n_P} \simeq \frac{e D_n n_P}{L_n} [e^{\frac{eV}{k_B T}}] = \frac{e D_n}{L_n} \cdot \frac{n_i^2}{N_a} [e^{\frac{eV}{k_B T}}] \\ = \frac{1.6 \cdot 10^{-19} \cdot 33.8 \cdot 2.25 \cdot 10^{20}}{1.84 \cdot 10^{-2} \cdot 0.58 \cdot 10^{18}} \cdot e^{\frac{0.6}{0.025}} \\ = 3.08 (\text{mA}/\text{cm}^2)$$

次に P 側と同様に、N 側の少数キャリア p_N の主電流となる拡散電流: $\mathbf{J}_{p_N} = e[-D_p \nabla p]$ だけについて見る。∇p も、N 側空乏層端 $x = x_n$ に注入された少数キャリア p_N^V が、拡散長 L_p を経て熱平衡状態における正孔密度 p_N に一致していくと考え、次のように差分近似する。以下、P 側と同様に式を展開する。

$$(0.67) \nabla p = \frac{p_N^V - p_N}{L_p} = \frac{p_N}{L_p} [e^{\frac{eV}{k_B T}} - 1], \quad p_N = \frac{n_i^2}{N_d}$$

ここで、L_p は少数キャリア p_N の拡散長で、

$$(0.68) L_p = \sqrt{D_p \tau_p} = \sqrt{9.07 \times 1.0 \cdot 10^{-6}}$$

$$= 3.01 \cdot 10^{-3} (\text{cm})$$

$$D_p = \frac{k_B T}{e} \mu_p^{(L)} = 9.07 (\text{cm}^2/\text{s})$$

とする。上式で、τ_p は正孔 p の寿命で τ_p = 1.0(μs) とし、μ_p^(L) には真性半導体における正孔のモビリティ: μ_p^(L) = 350(cm²/Vs) を使う。したがって、式(0.67)の第1項を使って、N側の少数キャリア p_N が担う正孔拡散電流 J_{p_N} は、バイアス V = 0.6(V) の時、次のように計算できる。

$$(0.69) J_{p_N} \simeq \frac{e D_p p_N}{L_p} [e^{\frac{eV}{k_B T}}] = \frac{e D_p}{L_p} \cdot \frac{n_i^2}{N_d} [e^{\frac{eV}{k_B T}}] \\ = \frac{1.6 \cdot 10^{-19} \cdot 9.07 \cdot 2.25 \cdot 10^{20}}{3.01 \cdot 10^{-3} \cdot 7.5 \cdot 10^{19}} \cdot e^{\frac{0.6}{0.025}} \\ = 0.0383 (\text{mA}/\text{cm}^2)$$

全電流 J は、 $J = J_{n_P} + J_{p_N}$ なので、以上により、ドーピング濃度が N_d ≫ N_a である場合には、階段接合を仮定した空乏近似解析解では、主に P 側の少数キャリアの電子拡散電流 J_{n_P} が全電流の 99% を占めることが分かる。順バイアスが V = 0.6(V) と 0.5(V) の場合の、少数キャリア拡散電流 J_{n_P}, J_{p_N} の計算値を Table 4 に示す。今、N_d = 7.5 · 10¹⁹(cm⁻³), N_a = 0.58 · 10¹⁸(cm⁻³) であるので、P 側の少数キャリア n_P が主役となる。(逆に、ドーピング濃度が N_d ≪ N_a である場合には、N 側の少数キャリア p_N が電流の主役となる。)

Table 4. Current J_{n_P}, J_{p_N} (mA/cm²) by V

V(V)	J _{n_P} (P-side)	J _{p_N} (N-side)
0.6	3.08(99%)	0.0383
0.5	0.0564(99%)	0.000701

結果と討論

CV 法シミュレーション結果との比較

シミュレーションでは、P 側、N 側の電極面において、電流 flux を積分すなわち数値的に足し合わせて、電流値を求める。物理的には、P 側と N 側の電流値は同じでなければならないので、

$$\begin{aligned} & -[\text{P 側電極に沿った } n \text{ 電流 } J_{n_P} (< 0) \text{ の線積分}] \\ & -[\text{P 側電極に沿った } p \text{ 電流 } J_{p_P} (< 0) \text{ の線積分}] \\ & = [\text{N 側電極に沿った } n \text{ 電流 } J_{n_N} (> 0) \text{ の線積分}] \\ & + [\text{N 側電極に沿った } p \text{ 電流 } J_{p_N} (> 0) \text{ の線積分}]: \end{aligned}$$

$$-J_{n_P} - J_{p_P} = J_{n_N} + J_{p_N}$$

のはずである。実際にシミュレーションでは、本報告で使う CV 法においては電流連続を満足するように差分化するので、両電極側の電流値の相対誤差 ΔJ:

$$\Delta J = \left(\frac{-J_{n_P} - J_{p_P}}{J_{n_N} + J_{p_N}} - 1 \right) \cdot 100 (\%)$$

は、0.001 %以下の精度である。シミュレーションによる、順バイアスが $V = 0.6(\text{V})$ と $0.5(\text{V})$ の場合の、各キャリアの電流値を Table 5 に示す。本報告のように、ドーピング濃度が $N_d \gg N_a$ である場合には、電子電流が主電流であるので、全電流 I_d としては、 J_{nN} を見る。この N 側電極の電子電流 J_{nN} は、全電流の 99.99 % を占め、階段接合を仮定した空乏層近似解析解 (Table 4 参照) と良く合う。

Table 5. Simulated current $J_n, J_p(\text{mA})$ by V

$V(\text{V})$	J_{nP}	J_{pP}
0.6	-2.95891	-0.00126
0.5	-0.65463	-0.00017

$V(\text{V})$	$J_{nN}(I_d)$	J_{pN}	$\Delta J(\%)$
0.6	2.95982(99.99%)	0.00035	0.0
0.5	0.65475(99.99%)	0.00004	0.0002

CV 法では、例えば、電子の移流拡散方程式については、微分形の式 (0.2): $\text{div}[-D_n \nabla n + (\mu_n \nabla \psi)n] = GR$ の元となる、保存則を満足する次の積分方程式に基づいて離散化して解く。

$$(0.70) \int_{\Gamma} [-D_n \nabla n + (\mu_n \nabla \psi)n] \cdot \mathbf{n} \, ds = \int_{\Omega} GR \, dv$$

が原点となる。ここで、 $[-D_n \nabla n + (\mu_n \nabla \psi)n]$ は単位面積当たり、単位時間当たりの流量ベクトル (flux) を表わし、 \mathbf{n} は Γ 上に立てた外向き単位法線ベクトルを表わす。 ds は面積要素、 dv は体積要素である。

式 (0.70) は、いわゆる電流連続の積分方程式を示し、「領域 Ω の表面 Γ からの全流出量 (全電流): $\int_{\Gamma} [-D_n \nabla n + (\mu_n \nabla \psi)n] \cdot \mathbf{n} \, ds$ が、領域 Ω 内での発生量: $\int_{\Omega} GR \, dv$ と等しい。」という物理量の保存則を表している。このとき、式 (0.70) の左辺をガウスの発散公式を使って体積積分に変形すると、

$$(0.71) \int_{\Omega} \text{div}[-D_n \nabla n + (\mu_n \nabla \psi)n] \, dv = \int_{\Omega} GR \, dv$$

となり、積分 $\int_{\Omega} dv$ をはずせば、微分形式 (0.2) が導出できる (ポアソン方程式 (0.1) も右辺の全電荷密度: ρ と左辺の電場の面積分との保存則である)。

2 次元シミュレータ上において、デバイスの奥行きを Zw 、電極長を l とすれば、電流値 I_d は、ドーピング濃度が $N_d \gg N_a$ の場合には、N 側電極における電子電流: $J_{nN} \approx I_d$ として、

$$(0.72) I_d = -e \cdot Zw \cdot \int_0^l [-D_n \nabla n + (\mu_n \nabla \psi)n] \cdot dl$$

と計算できる。

村田が、積分保存則を満足するように差分化するこの CV 法を勧めるのには理由がある。実際に Table 5 に見るように、0.001 %以下の精度で保存則を満足できること。また、例えば、式 (0.2) の拡散項の拡散係数 D_n は、 D_n と ∇n が直接くっついて物理的に意味がある。拡散電流は、電子密度勾配 ∇n に比例して、高濃度部から低濃度部に流れるからである。式 (0.2) のように微分形にしたときには、係数 D_n と ∇n を切り離れた上で、空間差分化してクランク・ニコルソン (台形法) によって解いてしまう誤りをおかしやすい。切り離れた場合、係数 D_n が場所によらず一定で、空間差分化を均等あみ目にした場合には問題が起きないが、実務上必要な、係数 D_n が場所による、差分化も不均等あみ目とする場合には、積分形 (0.70) の解とは違う誤ったものとなる。なぜこのような誤りをするかと言うと、電子 n の移流拡散方程式のモデル化の元になっている電流連続の保存則を忘れて、微分方程式がひとり歩きしてしまったことによる。そのような誤りをしないためにも、村田は CV 法を勧める。

以上に基づき、順バイアスを $V = 0.5$ と $0.6(\text{V})$ とした場合の、実験測定値 (Exp)、階段接合を仮定した空乏近似解析値 (Anal)、シミュレーション (Sim) による全電流値 I_d を比較すれば、Table 6 となる。

Table 6. Electric current I_d for Exp, Anal, Sim

Model	$I_d(V=0.5(\text{V}))$	$I_d(V=0.6(\text{V}))$
Exp	0.2(mA)	3.0(mA)
Anal	0.056(mA/cm ²)	3.08(mA/cm ²)
Sim	0.65(mA)	2.96(mA)

Table 6 によれば、順バイアス $V = 0.6(\text{V})$ 付近で電流が流れ始める特徴を持つシリコンダイオードにおいて、実験値と解析値およびシミュレーション値が、良く合っていると見てよい。

Table 7. Boundary condition of ohmic contact

V	$N_d(\text{cm}^{-3})$	$N_a(\text{cm}^{-3})$	$\psi_N^V(\text{V})$	$\psi_P^V(\text{V})$
0.0	$7.5 \cdot 10^{19}$	$0.58 \cdot 10^{18}$	0.578	-0.452
0.6	$7.5 \cdot 10^{19}$	$0.58 \cdot 10^{18}$	-0.022	-0.452

今、順バイアスがない場合: $V = 0.0(\text{V})$ と順バイアス $V = 0.6(\text{V})$ がある場合に、全電流 I_d 以外について解析解とシミュレーション解を比較することを考え、両者の良し悪しを見ることにする。ドーピング濃度が $N_d \gg N_a$ の場合なので、N 側空乏層は極めて狭く、P 側の少数キャリアの電子密度 n_P を考えればよい。まず、設定は、これまで通り、Table 7 とする。N 側電極と P 側電極の電位 ψ_N, ψ_P は解析

解で、シミュレーションでは、両電極電位の境界条件となる。

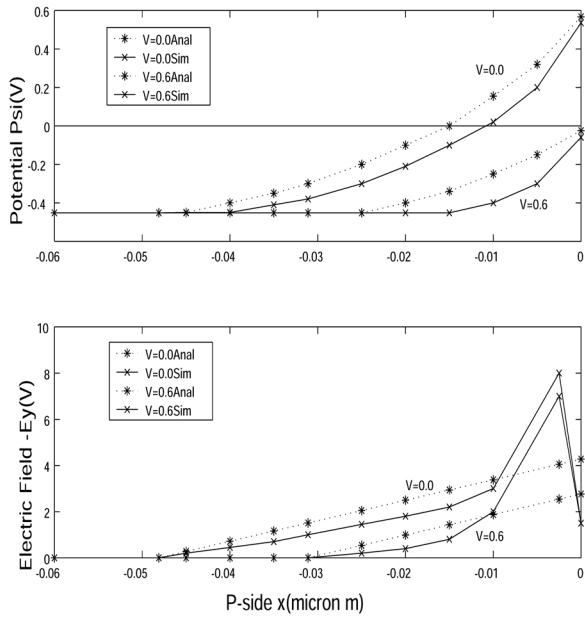


Fig.3. $\psi(x)$, $-E_y(x)$ in P-side depletion layer for $V=0.0, 0.6(V)$.

まず、電位 ψ 、PN 接合面に垂直な電場： $-E_y(=\nabla\psi)$ を見る。電位 $\psi(x)$ の解析値は式 (0.52) により、電場： $-E_y(x)$ の解析値は式 (0.38) により計算する。Fig.3 において、横軸は Fig.2 の原点から左側 (P 型) 座標を示し、電位 ψ (上図)、電場： $-E_y$ (下図) とも、実線がシミュレーション値、点線が解析値である。Fig.3 上図：電位 $\psi(x)$ の図の、バイアス $V=0.0, 0.6(V)$ それぞれにおいて、 $\psi(0)$ は N 側電極の電位境界条件： $\psi(x_n) = \psi_N - V$ 値となっている。順バイアスにかかる ($V = 0.6(V)$) ことによって、電位 $\psi(x)$ が平坦になるまでの幅である：P 側の空乏層幅 x_p が $\frac{2}{3}$ 程度に狭まることが良く見える。電位 ψ については、解析解と実際のシミュレーションとも近いが、電場： $-E_y$ については、電場最大値： E_{ymax} 値において、解析値より 2 倍ほどシミュレーション値の方が大きく、その勾配も線形ではない。Fig.3 下図においてシミュレーション値が、PN 接合面 ($x = 0$) 近くで尖っている理由は、シミュレーションの離散サンプル点間隔を $\frac{0.1}{40}(\mu\text{m})$ としたためであり、サンプル間隔を精しくすれば、頂点はもっと縦軸に寄る。したがって、シミュレーションにおいて $E_y(-0)$ 値としては、この頂点値を使う。シミュレーションで離散化分割数を 40 から 2 倍に精しくして、サンプル間隔を $\frac{0.1}{80}(\mu\text{m})$ とすれば、 $-E_y(-0)$ は $6.94 \cdot 10^5(V/cm)$ から、 $7.44 \cdot 10^5(V/cm)$ に 7% 高くなり、全電流値 I_d で見ると 2 倍精しくしたことで 27% 下がる (あみ目の精しさの妥当性について

は、後節で論ずる)。N 側の空乏層幅はドーピング濃度が高く極めて狭いので ($x_n = 0.00037(\mu\text{m})$)、N 側の電場は段階的に $-E_y(x > 0) \simeq 0$ となる。一方電場 $-E_y(x)$ の解析値としては、式 (0.52) の P 側の値： $-E(-0) = -E_y(-0)$ を使う。

以上を、数値でまとめたものが、Table 8 である。それぞれの順バイアスにおいて表の下段 () は、シミュレーション値である。Table 8 によれば、電位 $\psi(0)$ も含めて、 $\psi(x)$ の解析解は定性的にかなり良いので、空乏層幅 x_p は、バイアスがない場合も順バイアスを印加した場合でもシミュレーション結果と 3% 以内でかなり良く合う。PN 接合面で最大値となる電場： $-E_y$ の値については、前述通りシミュレーション値は解析値の 2 倍となり違う。

Table 8. Comparison of Anal and Sim($\psi, -E_y$)

V	model	$x_p(\mu\text{m})$	$\psi(+0)(V)$
0.0	Anal	0.0481	0.567
	(Sim)	(0.0475)	(0.536)
0.6	Anal	0.0311	-0.025
	(Sim)	(0.030)	(-0.059)

V	model	$I_d(\text{mA})$	$-E_y(-0)(\cdot 10^5 \frac{V}{\text{cm}})$
0.0	Anal	$0.0 \cdot \text{cm}^{-2}$	4.23
	(Sim)	(0.00159)	(8.08)
0.6	Anal	$3.08 \cdot \text{cm}^{-2}$	2.74
	(Sim)	(2.96)	(6.94)

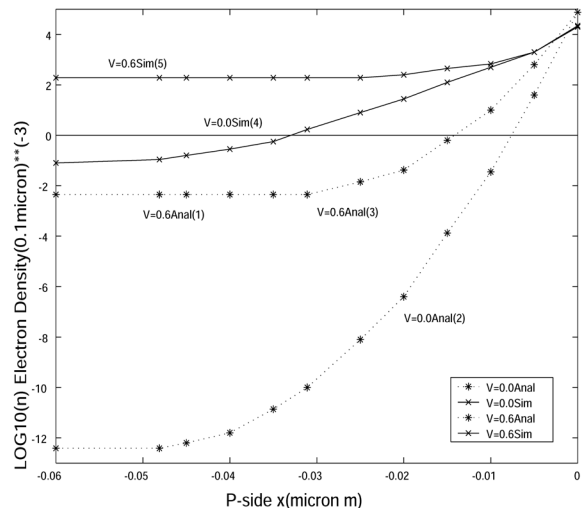


Fig.4. $n_p(0.1\mu\text{m}^{-3})$ carrier in P-side depletion layer for $V=0.0, 0.6(V)$.

順バイアスによって生じた、N 側から注入された P 側の電子少数キャリア n_p の解析上の拡散長 (式 (0.65))： $L_n = \sqrt{D_n \tau_n} = 1.84 \cdot 10^{-2}(\text{cm})$ は、順バイアス $V=0.6(V)$ を印加した空乏層幅 $x_p =$

0.0311(μm) (解析値) よりずっと長い。今、Fig.4において、主に全電流に寄与するP側の少数キャリア n_P について、シミュレーションと解析モデルを比較してみる。P側の n_P が担う電子拡散電流 J_{n_P} を概算するために近似して見積もった式(0.64)：

$$\nabla n = \frac{n_P^V - n_P}{L_n}, n_P \text{はオーミック境界条件}$$

は、P側の空乏層端 $x = -x_p$ において、順バイアス V によって電子少数キャリア n_P が増えて空乏層境界に生じ、拡散長 L_n によって拡散すると仮定している。Fig.4においては、順バイアス $V=0.6(\text{V})$ の場合に、直線(1)となることと同義である。これは空乏層端 $x = -x_p = -0.0311(\mu\text{m})$ から、拡散長 L_n によって $1.84 \cdot 10^{-2}(\text{cm})$ 先で、 n_P^V は線形的に n_P に落ちると仮定することに対応する。Fig.4において、横軸は $x > 0$ がN側(図にはない)、 $x < 0$ がP側、縦軸には $\text{LOG}_{10}n_P$ がとってあり、 n_P は $(0.1\mu\text{m}^{-3})$ 単位とする。N側の n_N はドーピング濃度 N_d で、 $\text{LOG}_{10}n_N$ は4.88となり、P側のオーミックコンタクト条件である、 $n_P = 3.88 \cdot 10^{-13}(0.1\mu\text{m}^{-3})$ は、 $\text{LOG}_{10}n_P$ で-12.4となる。実線はシミュレーション結果で、点線は解析値を表わす。

ここで、P側空乏層において、空乏近似による電位 $\psi(x)$ の解析式(0.51)：

$$\psi(x) = \frac{eN_a}{2\epsilon}x^2 + \frac{eN_a}{\epsilon}x_p x + \frac{eN_a}{2\epsilon}x_p^2 + \psi_P$$

(P側： $-x_p \leq x \leq 0$)

を、電子密度 n を与える解析解(式(0.6))：

$$n = n_i \cdot e^{\frac{e}{k_B T}(\psi - \phi_n)}$$

に、疑似フェルミポテンシャル $\phi_n = -V$ (V は順バイアスで正)として近似的に一定値を代入すれば、実際には n の移流拡散方程式(0.4)を解かねばならないが、近似解析解として、バイアスなし $V=0(\text{V})$ の場合には、

$$n(x) = n_i \cdot e^{\frac{e}{k_B T}\psi(x)},$$

順バイアス $V=0.6(\text{V})$ を印加した場合には、

$$(0.73) \quad n(x) = n_i \cdot e^{\frac{e}{k_B T}(\psi(x)+V)}$$

と計算でき、電子密度 n は $e^{\frac{eV}{k_B T}}$ だけ増える。順バイアス $V=0.0(\text{V})$ の場合の解析解はFig.4の点線曲線(2)、 $V=0.6(\text{V})$ の場合の解析解は点線曲線(3)となる。このとき、順バイアス $V=0.6(\text{V})$ で、

$$x_p = 0.0311(\mu\text{m}), \quad \psi(-x_p) = \psi_P = -0.452,$$

$$n(-x_p) = n_i \cdot e^{\frac{e}{k_B T}(-0.452+0.6)} = n_P^V = n_P e^{\frac{eV}{k_B T}}$$

となり、 $V=0.6(\text{V})$ における ∇n (式(0.64))の近似式を表わした直線(1)は、空乏層端 $x = -x_p$ で解析解 $n(x)$ (式(0.73))の曲線(3)とつながる。空乏層内において、空乏近似で $n(x) = 0$ とすることは、曲線(3)を階段直線($\text{LOG}_{10}0$)で近似してしまうことになる。 $V=0.0(\text{V})$ の場合の曲線(2)も同様に、階段直線で近似することになる。

しかし、実際のシミュレーションでは、順バイアス $V=0.0(\text{V})$ の場合には実線曲線(4)となり、 $V=0.6(\text{V})$ では実線曲線(5)となる。Fig.4の実線(5)によれば、順バイアス $V=0.6(\text{V})$ を印加した場合、P側の電子少数キャリアが、N側の電子多数キャリア($=N_d = n(0)$)と同程度まで増加することが分かる(解析値の $n(0)$ はN側の多数キャリア密度を表わす)。シミュレーションによるP側電子密度 n (曲線(4)(5))は、空乏層から遠ざかるにつれて n は下がり、P側電極端では解析解と同様に、オーミックコンタクト条件を満たすように境界条件を設定してある。解析解とシミュレーション結果の比較によれば、いづれにしても、空乏層内ではキャリアが0であるわけではないが、定量的にもかなり良い近似になっていることが分かる。

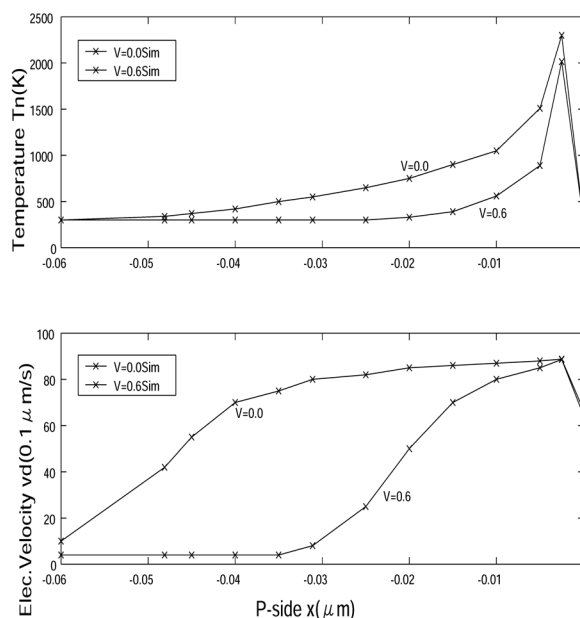


Fig.5. Simulated $T_n, v_d = \mu_n E_y$ in P-side depletion layer for $V=0.0, 0.6(\text{V})$.

Table 9. Simulation($T_n(\text{K}), \mu_n(\frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}), E_y(\cdot 10^5 \frac{\text{V}}{\text{cm}}), v_d(\frac{0.1\mu\text{m}}{\text{s}})$) results

V	T_{nmax}	μ_{nmin}	E_{ymax}	v_{dmax}
0.0	2300	10.99	8.08	88.8
0.6	2014	12.76	6.94	88.6

シミュレーションを使えば、電子温度 T_n 、モビリティ μ_n 、電子キャリアドリフト速度 $v_d = \mu_n E_y$ も解析できる利点がある。Fig.5 上図に T_n 、下図に v_d を、横軸を $x < 0$ として、Fig.3,4 と同じスケール (P 側空乏層) で示してある。接合面では電場: $-E_y(-0)$ が最大となり、モビリティ $\mu_n^{LIF} = \mu_n$ が最小となるので (モデル式 (0.22))、電子温度 T_n は最大となる (式 (0.19): $T_{nmax} = T_n(\mu_{nmin}(E_{ymax}))$)。モビリティの電場依存のモデル式 (0.22) では、ドリフト速度 $v_d = \mu_n E_y$ が、 $v_n^{sat} = 0.90 \cdot 10^7$ (cm/s) で飽和するようにモデル化しているので、Fig.5 下図の接合面での最大ドリフト速度 v_d は、 v_n^{sat} を超えない。空乏層の外側では、電場: $E_y = 0$ で、電子温度 T_n は格子温度 (300(K) とする) となり、モビリティ μ_n はドーピング濃度だけに依存し、濃度が高いほど μ_n は小さくなる。Fig.5 における P 側接合面上の数値 (最小、最大) をまとめると Table 9 となる。

以上をふまえて、順バイアスに対する全電流 I_d 特性について、実験値と、解析解 (0.66): $J_{n,p} \approx \frac{eD_n n_p}{L_n} [e^{\frac{eV}{k_B T}}]$ (mA/cm²) とシミュレーション結果を比較すれば、Table 10 となる。図は、Fig.6 となる。

Table 10. Electric current I_d (mA) versus V (V)

V	0.50	0.54	0.59	0.63	0.67
Exp	0.20	0.50	2.0	5.0	10.0
Anal	0.056	0.279	2.06	10.22	50.61
Sim	0.650	1.19	2.55	4.61	8.10

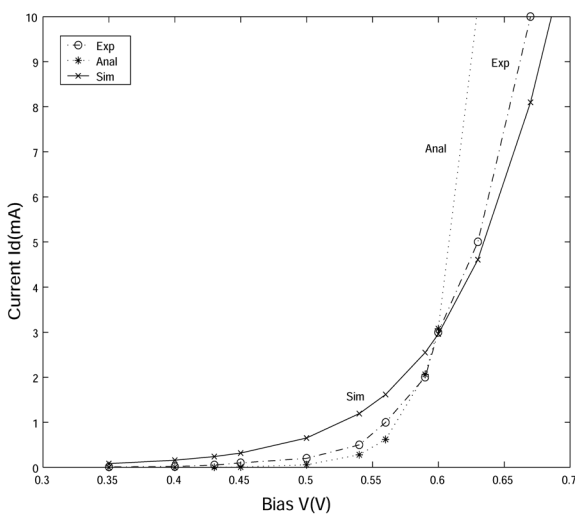


Fig.6. Current I_d for bias V (V)(Exp, Anal, Sim).

物理学実験 I で使用するシリコンダイオードは、製番 11R1SC で定格電圧 100V、定格電流 10A のもので、 N_d, N_a のドーピング濃度は不明であるが、Table 7 のように設定して I_d 特性を比較した。Fig.6

によれば、解析解 (点線) は全電流 I_d の立ち上がりが実験値 (一点鎖線) に比べ鋭い。シミュレーション結果 (実線) は、実験値に比べ I_d の流れ出しが穏やかであるが、バイアス $V = 0.6$ (V) 以降のシリコンダイオードに特有な特性は実験値にほぼ合っている。総じて、シミュレーション結果は、実験結果を再現できていると言える。また、PN 階段接合を仮定して空乏近似を行なったダイオード解析モデルは、実験のかかなり良い近似になっていることが、シミュレーション結果との比較という観点からも分かった。

なお、離散化分割幅を $\frac{0.1(\mu m)}{40}$ とした場合に、Fig.6 の 1 計算点 $I_d(V)$ をシミュレーションするのに凡そ 60 秒かかる。使用 PC は 2009 年製、日立 HP dc7900SF を使い、CPU は Core2Duo E8600, 3.33GHz の Clock を持ち、メモリは 4GB である。この CPU 時間は、18 年前の Clock が 100MHz、96MB メモリのワークステーション: 日立 HP712/100 と比べると、凡そ $\frac{1}{100}$ になっている。このワークステーションは当時の汎用機日立 M680H IAP2 付き、64MB メモリと同等の性能を持っていた。実務上、シミュレーションには CPU の性能向上とメモリの増量が不可欠であった。次に、逆バイアス時の降伏特性の理解にこそ、シミュレーションの手助けが必要であることを示し (それが利点)、その後、PN 接合シリコンダイオードにおける、CV 法によるデバイスシミュレーションの実装について論ずる。

逆バイアスの場合 (GR 項の効果と降伏)

キャリア生成結合項 (GR 項) は、移流拡散方程式 (0.2)(0.3) の右辺を成す。元の積分形で見れば式 (0.70) の右辺を成し、CV 領域内 (Ω 内) のキャリア生成結合を表わす。GR 項のシミュレーションモデルは、物理的な側面から次の 3 項から構成する。

$$(0.74) GR = (GR)_{SRH} + (GR)_{Aug} + Ga$$

[1] $(GR)_{SRH}$: 熱的なキャリアの生成消滅項で Si の格子欠陥、ドーピング濃度に依存。

$$(0.75) (GR)_{SRH} = \frac{n_i^2 - p \cdot n}{\tau_n(p + n_i) + \tau_p(n + n_i)} \quad (\text{cm}^{-3}\text{s}^{-1})$$

$$\tau_n = \frac{3.94 \times 10^{-4}}{1 + \frac{N}{7.1 \times 10^{15}}}, \tau_p = \frac{3.94 \times 10^{-5}}{1 + \frac{N}{7.1 \times 10^{15}}}, N = N_d + N_a$$

$(GR)_{SRH} > 0$ ならば発生割合で、 $(GR)_{SRH} < 0$ ならば再結合割合を表す。 τ_n, τ_p (sec) は、ドーピングに依存する電子、正孔のライフタイム。Langer による式。

[2] $(GR)_{Aug}$: 電子と正孔のペアが再結合して消滅し、第3のキャリアがそのエネルギーを得る過程(オージェ過程)。

$$(0.76) (GR)_{Aug} = (n_i^2 - p \cdot n)(C_n \cdot n + C_p \cdot p) \quad (\text{cm}^{-3}\text{s}^{-1})$$

$$C_n = 2.8 \times 10^{-31}, \quad C_p = 9.9 \times 10^{-32} \quad (\text{cm}^6\text{s}^{-1})$$

[3] Ga : オージェ過程と逆の経過によるインパクトイオン化によるキャリア生成で電流密度と電場に依存。

$$(0.77) Ga = \frac{|J_n|}{e} \alpha_n + \frac{|J_p|}{e} \alpha_p \quad (\text{cm}^{-3}\text{s}^{-1})$$

$$\alpha_n = A_n \cdot e^{\frac{-B_n}{|E_y|}}, \quad \alpha_p = A_p \cdot e^{\frac{-B_p}{|E_y|}} \quad (\text{cm}^{-1})$$

$$A_n = 7.0 \times 10^5, \quad A_p = 1.588 \times 10^6 \quad (\text{cm}^{-1})$$

$$B_n = 1.23 \times 10^6, \quad B_p = 2.036 \times 10^6 \quad (\text{Vcm}^{-1})$$

ここで α_n, α_p は、電子と正孔のイオン化係数であり、キャリアが単位長さを走行する時に発生する電子-正孔のペアの数を表す。電流密度 J に垂直方向では、イオン化は起こらないので、 α_n, α_p の計算では、電場 E のPN接合面に垂直な方向 (y 方向) の成分: $|E_y|$ を使うと良い。報告者は、ここで $|E|$ ではなく、 $|E_y|$ を使うことによって、n-MOSシミュレーションにおいて、基盤電流 I_{sub} とゲート電圧 V_G との特性について定性的に妥当なシミュレーション結果が得られることを確認している。

3項目の Ga 項は、逆バイアス印可時のアバランシェ降伏逆電流をシミュレーションするのに必須である。例えば、n-MOSの全電流 I_d 特性においては、ドレイン電圧 V_D を上げた時に、飽和領域から先のアバランシェ・ブレイクダウン電流をシミュレーションするのに必須となる。

PN接合シリコンダイオードに逆バイアスを印加する(バイアス V が負)と、少数キャリアが式(0.59): $n \cdot p = n_i^2 \cdot e^{\frac{eV}{k_B T}}$ のように指数関数的に減少し、ビルトイン電圧 ϕ_S^V も逆バイアスによって $\phi_S^V = \phi_S - V$ と増え、電場 E_y が大きくなる。逆バイアスでは、順バイアス時とは逆に、少数キャリアの減少により減る拡散電流よりも、電場が大きくなったことにより増えるドリフト電流が主流になる。しかし、少数キャリア密度としては小さくなるので、微流のドリフト逆電流(1(nA)程度)が流れる。さらに逆バイアスを大きくしていくと、電場 E_y が大きくなることで降伏を起こし逆電流が流れる。

極端に高濃度にドーピングされた階段接合においては、低い逆バイアスでは降伏の構造はツェナー効果(トンネリング)が主で、逆バイアスをさらに上げた場合にはアバランシェ効果(インパクトイオン)が主になるとされる。ツェナー過程には、 $10^6(\frac{V}{\text{cm}})$ オーダー以上の電場 E_y が必要となる。ドーピング量を変えることにより作られる電位勾配の大きさ E_y を制御することにより、降伏が起きる電圧が特定の値を持つように設計することができる。軽くドーピングした場合はトンネル現象によるツェナー効果は無視できるが、その代わりに、高いエネルギーを持つキャリアのインパクトイオン過程によるアバランシェ効果が主となる。この時、降伏は鋭く、降伏後の電流は本質的に電圧に依存しない⁷⁾。それ以上の逆バイアス電圧を印加しても電圧降下は降伏電圧となる。このため、降伏ダイオードは、電気回路に供給される電圧を安定化するために使われる。降伏ダイオードと不安定の電圧源を並列に逆バイアスになるように接続すれば、その電圧が降伏電圧を超えた時にアバランシェ効果等が起き、定電圧が維持できる。通常は、降伏過程がツェナー効果であっても、アバランシェ効果であっても「ツェナーダイオード」と総称される。

アバランシェ過程においては、逆バイアスによって電場 E_y がバイアスなし時より大きくなり(順バイアスでは電場 E_y がバイアスなし時よりも小さくなる)少数キャリアが加速され、電場 E_y が最大となるP側接合面付近で、通常の格子・キャリア散乱過程でキャリアが十分なエネルギーを持つと、電子・正孔対が発生する。発生したキャリアは電場によってドリフト電流となり、さらに雪崩現象を引き起こす。このインパクトイオン過程によるキャリア対発生割合を、電場 E_y の大きさによって指数関数的に増えるようにモデル化したものが式(0.77)である。

Table 11. Electric current I_d (mA) for bias V (V) ($E_{y\max}(\frac{V}{0.1\mu\text{m}})$, $T_{n\max}$ (K), $\mu_{n\min}(\frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}})$)

V	GR	I_d	$E_{y\max}$	$T_{n\max}$	$\mu_{n\min}$
0.6	0	2.96	6.94	2014	12.76
0.6	GR	2.63	6.94	2013	12.77
-0.6	0	-8.1D-6	8.83	2489	10.06
-0.6	GR	-0.279	8.83	2088	10.06

シミュレーションによれば、キャリア n と p の移流拡散方程式(0.2)(0.3)の右辺 GR 項を $GR=0$ とした時と、 GR 項を入れた時とで、次の結果を得る。順バイアス $V = 0.6$ (V) と逆バイアス $V = -0.6$ (V) でシ

ミュレーションした。Table 11において、 E_y, T_n, μ_n はP側接合面での値で、それぞれ極値を取る。この表によれば、順バイアスでは、ほとんどGR項の効果(10%)はでないが、逆バイアスでは、電場 E_y が大きくなる効果がGa項を介して大きく現れる。逆バイアス $V = -0.6(V)$ で、 $GR = 0$ の場合には流れなかった電流が、 $-0.279(mA)$ も流れる。

この全電流 I_d を、P側とN側の電極においてキャリア毎に詳しく見るとTable 12となる。ここでは、後節で述べるCV法のCV領域の法線方向の向きとの関係から、

J_{nN} : N側電極の電子電流(正:拡散, 負:ドリフト)

J_{pN} : N側電極の正孔電流(正:拡散, 負:ドリフト)

J_{nP} : P側電極の電子電流(負:拡散, 正:ドリフト)

J_{pP} : P側電極の正孔電流(負:拡散, 正:ドリフト)

である。Table 12によれば、順バイアス $V = 0.6(V)$ では、すでにN側もP側も電子の拡散電流は流れており($J_{nN} > 0, J_{nP} < 0$)、GR項を入れると、 $GR = 0$ にはなかったインパクトイオンによるpn対生成によるP側の正孔ドリフト電流($J_{pP} > 0$)が1割程度増えるだけである。これは、順バイアスの場合には、順バイアスによる少数キャリアの増加の方が、pnの対生成より効くということを示す。したがって、順バイアスではGR項を入れても、拡散電流による全電流 I_d はほぼ変わらない。

Table 12. Current(mA) on ohmic contacts for V

V	GR	$Ga(\frac{1}{cm^3s})$	J_{nN}	J_{pN}
0.6	0	0	2.9598	3.5130D-4
0.6	GR	0.315D28	2.6366	4.6686D-4
-0.6	0	0	8.12D-6	2.44D-12
-0.6	GR	0.173D25	-0.27936	5.8972D-5
-6.3	GR	0.128D28	-1.6836	7.3956D-5

V	GR	J_{nP}	J_{pP}	$I_d(mA)$
0.6	0	-2.9589	-1.2567D-3	2.96
0.6	GR	-2.9505	0.3134	2.64
-0.6	0	-8.11D-6	-4.34D-9	-8.12D-6
-0.6	GR	-7.89D-6	0.27932	-0.279
-6.3	GR	-1.75D-8	1.6836	-1.68

しかし、逆バイアスでは、 $GR = 0$ の時は全電流 I_d は流れないが、GR項を入れると、大きな逆バイアス電場 E_y により少数キャリアが減り全電流は小さくとも、大きなインパクトイオン項Gaによるpn対生成が起き(Table 12によれば $V = -0.6(V)$ で $10^{28}(cm^{-3}s^{-1})$ オーダー)、これが主因となり、N側では電子ドリフト電流($J_{nN} < 0$)、P側では正孔の

ドリフト電流($J_{pP} > 0$)が流れ、拡散電流とは逆向きに全電流 I_d が流れ出す。

GR項を入れて、順バイアス $V = 0.8, 0.6, 0.0(V)$ と、逆バイアス $V = -0.6, -6.3, -6.5(V)$ のシミュレーションを行なった結果がTable 13である。順バイアスの拡散電流の I_d 特性は、 $GR = 0$ とほぼ変わらないが、逆バイアスでは、 $V = -6(V)$ を超えてから急にドリフト降伏電流が流れ出す。逆バイアス $V = -6.3(V)$ からは、それ以上逆バイアスを印加しても、ドリフト電流は増えるが電圧降下は一定の降伏電圧となることがシミュレーションで再現できている。

Table 13. Current(mA) with GR for V

$(I_d(mA), T_n(K), E_y(\frac{V}{0.1\mu m}), \mu_n(\frac{cm^2}{Vs}), Ga(\frac{1}{cm^3s}))$

V	I_d	T_{nmax}	E_{xmax}	μ_{nmin}	Ga
0.8	36.9	1754	5.90	15.0	2.6D28
0.6	2.64	2013	6.94	12.8	3.2D27
0.0	0.00	2300	8.08	11.0	1.2D24
-0.6	-0.28	2488	8.83	10.1	1.7D24
-6.3	-1.68	3558	13.09	6.8	1.3D27
-6.5	-13.7	3558	13.09	6.8	5.9D28

物理学実験Iでは、同種のシリコンツェナーダイオードによって、逆バイアス時の降伏特性を見る実験も行なっている。実験では、まず、このツェナーダイオードが、順バイアスでは整流特性を持つ通常のシリコンダイオードとほぼ同じ I_d 特性をもつことを確認する。Table 14に、順バイアス時の実際の両者の実験測定値を示す。それらは先にTable 10で述べたように、 $GR = 0$ のシミュレーション値ともほぼ同じ特性を示す。

Table 14. Experimental $I_d(mA)$ on diode and zener for V(V)

Type	0.35	0.50	0.54	0.6	0.63	0.67
Diode	0.01	0.20	0.50	3.0	5.0	10.0
Zener	0.01	0.20	0.50	2.0	5.0	10.0

関心のあるツェナーダイオードの逆バイアスにおける実験結果(Exp)と、GR項を入れたシミュレーション結果(Sim)を比較するとTable 15となる。グラフは、Fig.7となる。

Table 15. Zener current $I_d(mA)$ on Exp and Sim for $-V(V)$

Type	-6.5	-6.2	-6.0	-5.5	-5.0
Exp	-39.0	-7.2	-2.6	-0.56	-0.16
Sim	-13.7	-1.17	-0.897	-0.647	-0.536

この結果は、通常のシリコンダイオードをシミュレーションしたドーピング濃度 (Table 7) で、PN 階段接合ダイオードを作れば降伏電圧: V_{BD} が $V_{BD} = -6.5(V)$ のツェナーダイオードが設計できることを示す。PN 傾斜接合の場合には、降伏電圧はさらに大きくなる。Fig.7のグラフから物理学実験で使ったツェナーダイオード (RD-5C) とシミュレーションによる降伏電圧 V_{BD} はほぼ一致する ($V_{BD} = -6.5(V)$)。降伏電圧の解析解は、空乏近似では解けない。

以上まとめれば、順バイアス時もほぼ一致 (Table 14) するので、ツェナーダイオード実験値とシミュレーション結果は良く合うことが分かる。言い換えれば、Table 16 上段のこれまでのドーピング濃度 (階段接合) 条件のダイオードは、実はツェナーダイオードのシミュレーションをしたと考えて良いことになる。

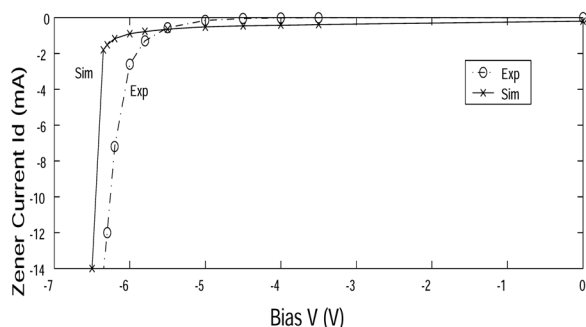


Fig.7. Zener current I_d (mA) for V (Exp, Sim).

Table 16. Device simulation for diode by doping (N_d, N_a (cm^{-3}), ϕ_S (V), V_{BD} (V)) (ψ_N, ψ_P (V)($V=0$), I_d (mA)($V=0.6$))

Type	N_d	N_a	ψ_N	ψ_P
zener	7.5D19	0.58D18	0.578	-0.452
diode	0.7D19	0.2D17	0.516	-0.364

Type	N_d	N_a	ϕ_S	I_d	V_{BD}
zener	7.5D19	0.58D18	1.03	2.96	-6.5
diode	0.7D19	0.2D17	0.88	1.82	-19.8

逆バイアスでは、通常の整流作用を持ち、順バイアスでは、実験で使ったツェナーダイオードと同じような I_d 特性を持つダイオードは、 N_d を薄く、 N_a も薄くするドーピング条件で実現できる。ツェナーダイオードと通常のダイオードの違いは、ドーピングの濃度の違いがあるだけで、それによって降伏電圧を設計できる。通常のダイオードは、大きな逆バイアス電圧で降伏を起こすツェナーダイオードと言い換えても良い。シミュレーションによれば、 $N_d \gg N_a$ のままとすると、例えば、Table 16 下段のよ

うに、 N_d を $\frac{1}{10}$ 程度、 N_a を $\frac{1}{30}$ 程度にすると、ビルトイン電圧 ϕ_S は小さくなり、PN 接合面で電場 E_y も小さくなり、このときも、順バイアス $V = 0.6(V)$ で $I_d = 1.82(mA)$ と上段条件とほぼ同程度の全電流が流れるダイオードができる。このとき、これがデバイス解析シミュレーションの正当な使い方であるが、この Table 16 下段のダイオードでは、逆バイアス時の降伏電圧 V_{BD} は、 $V_{BD} = -19.8(V)$ となることが分かる。通常の逆バイアス $V = -6(V)$ 付近では、整流作用を保つ。このようにシミュレーションは、デバイス解析を通して、解析ではできないダイオードの降伏動作を理解し易い利点がある。

CV 法によるシミュレーション (場の設定)

CV 法によるシミュレーションの方法について論ずる。まず、ダイオードの場の設定から始める。Fig.8 のように、横 (y) 方向 11(cm)、縦 (x) 方向 10(cm) の 2 次元平面を考える。縦横とも 1(cm) は、実際の $0.1(\mu m)$ とする。電流計算に使う奥行き (z) 方向は、 $38(\mu m)$ とする。縦 (x) 方向上側の $0.5(\mu m)$ を P 型、下側の $0.5(\mu m)$ を N 型として、階段接合型の一様の N_a, N_d ドーピング濃度を設定する。

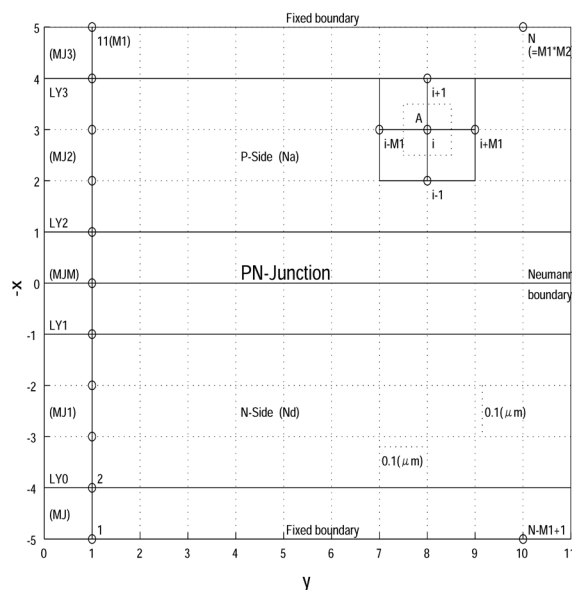


Fig.8. Simulation field for diode.

このとき、ポアソン方程式 (0.1) 右辺の電荷密度 ρ は、P 側で $\rho = p^+ - n^- - N_a^-$ 、N 側で $\rho = p^+ - n^- + N_d^+$ となる。実務上は、P 型基板に N 型イオンを打ち込み熱拡散させ、N 型を作るので、N 型濃度分布はガウス型分布や傾斜型に設定するが、本シミュレーションでは階段近似空乏層解析モデルとの比較のために、あえて階段型とする。

Fig.8 において、上側端は P 型オーミック電極の電位 ψ_P の固定境界、下側端は N 型オーミック電極

の電位 $\psi_N - V$ (バイアス) の固定境界、左右の両側端は $\text{flux}=0(\text{div}[\frac{J_n}{\epsilon}] = 0)$ 等のノイマン境界とする。ここでの離散化は、村田にならって $1\text{cm}(0.1\mu\text{m})$ 毎に分割数を設定する。例えば、 1cm を MK 分割すれば、1つの離散幅は $\frac{0.1}{\text{MK}}(\mu\text{m})$ となる。物理量も $0.1(\mu\text{m})$ 単位として考え、密度も cm^{-3} ではなく、 $0.1\mu\text{m}^{-3}$ 単位で与える。こうすることにより、計算の有効数字の桁数を下げるとともに、数値をスケールリング (無次元化) するよりも数値の物理的イメージがぐんと得やすい。

この方針で、実務上必要な離散化不均等あみ目を次のように設定する。PN 接合面等の大事な所：精度に影響する所を精しくできるようにする。縦 (x) 方向で PN 接合面から上下 $0.1(\mu\text{m})$ 内：Fig.8 で $4\text{cm}(\text{LY}1)$ から $6\text{cm}(\text{LY}2)$ までは $2 \times \text{MJM}$ 分割数とする。これに習って上下対称のあみ目とし、縦 (x) 方向あみ目は次のようにする。

- 0-1(LY0) : $1 \times \text{MJ}$ 分割
- 1(LY0)-4(LY1) : $3 \times \text{MJ}1$ 分割
- 4(LY1)-6(LY2) : $2 \times \text{MJM}$ 分割
- 6(LY2)-9(LY3) : $3 \times \text{MJ}2 (= 3 \times \text{MJ}1)$ 分割
- 9(LY3)-10(LYM) : $1 \times \text{MJ}3$ 分割

横 (y) 方向は、等方的で物理的に差がなく特に精しくする場所もないので、均等あみ目： $\text{MK} = \frac{\text{MJ}1}{2}$ とする。実際に不均等あみ目にしても精度に 0.2% 程度の差しかない。まとめれば、あみ目は Table 17 となる。

Table 17. Mesh plan ($\text{MK} (= \frac{\text{MJ}1}{2})$)

	0-1	1-4	4-6	6-9	9-10
x	MJ	$3 \times \text{MJ}1$	$2 \times \text{MJM}$	$3 \times \text{MJ}1$	MJ3
y	MK	$3 \times \text{MK}$	$2 \times \text{MK}$	$3 \times \text{MK}$	MK

	10-11
x	-
y	MK

したがって、場の離散化による全節点数は、 y 方向の節点数を $M1$ 、 x 方向の節点数を $M2$ とすれば、 $N = M1^{(x)} \times M2^{(y)} = (\text{LY}0 \times \text{MJ} + (\text{LY}1 - \text{LY}0) \times \text{MJ}1 + (\text{LY}2 - \text{LY}1) \times \text{MJM} + (\text{LY}3 - \text{LY}2) \times \text{MJ}2 + (\text{LYM} - \text{LY}3) \times \text{MJ}3 + 1) \times (2 \times 4 \times \text{MK} + 3 \times \text{MK} - 1)$ となる。今、 $\text{MJM} = 40$ (40 系列)、 $\text{MJ}1 = \frac{\text{MJM}}{2}$ 、 $\text{MJ}2 = \text{MJ}1$ 、 $\text{MJ} = \frac{\text{MJM}}{4}$ 、 $\text{MJ}3 = \text{MJ}$ 、 $\text{MK} = \text{MJ}1$ とすると、全節点数 N は、

$N = M1 \times M2 = 221 \times 219 = 48399$ (元) となる。 MJM の精しさで、場全体の不均等あみ目

が連動して変わるようにし、 $\text{MJM} = 40$ で「40 系列」と称す。

この離散化により、CV 法では、元数 $N = 48399$ の連立一次方程式を解くことになる。もし、この連立一次方程式をソルバとしてガウスの消去法を使えば、メモリは $N \times N \times 8 (\text{Byte}) = 18.7 (\text{GByte})$ が必要になる。たとえ、メモリに入っても CPU 計算時間が膨大になり、ガウスの消去法は理論上使えても、実務上は使えない。したがって、反復法のソルバを使う。40 系列を基本とした反復法ならば、ポアソン方程式 (0.1) を解く対称行列の場合には、 $N \times 8 \times 5 (\text{Byte})$ で済み、移流拡散方程式 (0.2)(0.3) を解く非対称行列の場合でも、 $N \times 8 \times 9 = 3.5 (\text{MByte})$ で済む。実際には他に作業領域： $N \times 8 (\text{Byte})$ を 40 本使うので、約 $20 (\text{MByte})$ のメモリを必要とする。前述の PC で、約 5K のプログラムに富士通 FORTRAN V4.0L10 コンパイラを使い、順バイアス $V = 0.6 (\text{V})$ の I_d 計算をすると 91(sec) の CPU 時間を要する。

Table 18. EPSN for each solver

Eq.	Mat.	Solver	EPSN
$\psi(0.1)$	Sym.	MICCG(1.3)	0.5D-9
$n(0.2)$	NonSym.	BCGSTAB(1.3)	0.5D-9
$p(0.3)$	NonSym.	BCGSTAB(1.3)	1.0D-9

Eq.	$\frac{\text{EPSN}}{\text{EPSDIV}}$	(EPSDIV)	EPSNO
$\psi(0.1)$	0.25D-10	2.0D1	-
$n(0.2)$	0.5D-10	1.0D1	-
$p(0.3)$	1.0D-10	1.0D1	-
Gummel			2.0D-3

対称行列と非対称行列では、ソルバが違い、非対称行列は解きづらく、対称行列に比べ 3 倍余計に CPU 時間がかかる。ここでは、対称行列には「Gustafsson 流の補正を行なった不完全コレスキー分解による前処理つき共役勾配法」：MICCG(1.3) を、非対称行列には「スタブ入りの双共役勾配法」：BCGSTAB(1.3) を使う (Table 18)。反復法には、収束判定が必然となる。各方程式毎に Table 18 のように、それぞれの準ニュートン反復の反復収束判定値：EPSN を設定する。各方程式の内部においては、その準ニュートン反復内における勾配を利用した解の探索反復を行ない、その収束判定値を、EPSN をある乗数 (EPSDIV) で割ることによって作り、EPSN より精しい収束判定値： $\frac{\text{EPSN}}{\text{EPSDIV}}$ を設定する。逆バイアスのような電流が流れない条件では、EPSN、EPSNDIV 等をさらに精しくする必要がある。また Table 18 のように、ソルバと解く方程式によって判定値は調整する。さら

に、ダイオードの場合には後述のガンメル反復で、各方程式のつじつまが合うように全体の収束判定を行ない、収束判定値を $EPSNO=2.0D-3$ とする。

今、順バイアスが $V = 0.6(V)$ の時に、あみ目を MJM によって精しくして精度を見れば、Fig.9 となる。MJM にしたがって、 I_d 計算値の精度と CPU 時間の推移を見る。MJM を増やせば、元数 N が増えメモリも増え CPU 時間が増大する。MJM=136 とすれば、 $N=559503$ 元 ($M1=749, M2=747$) となり、40 系列の約 10 倍のメモリを必要とし、CPU 時間は 7 倍となる。MJM=136 の結果を基準にして、約 2% の精度が必要ならば、ぜひとも MJM=96 が欲しいことが分かる (Table 19)。CPU 時間では 3 倍の負担となる。Table 19 から、MJM=96 では、 $N=278783$ 元 ($M1=529, M2=527$)、CPU 時間：302(sec) となる。40 系列では約 2 割違うが、CPU 時間のためにはがまんする。

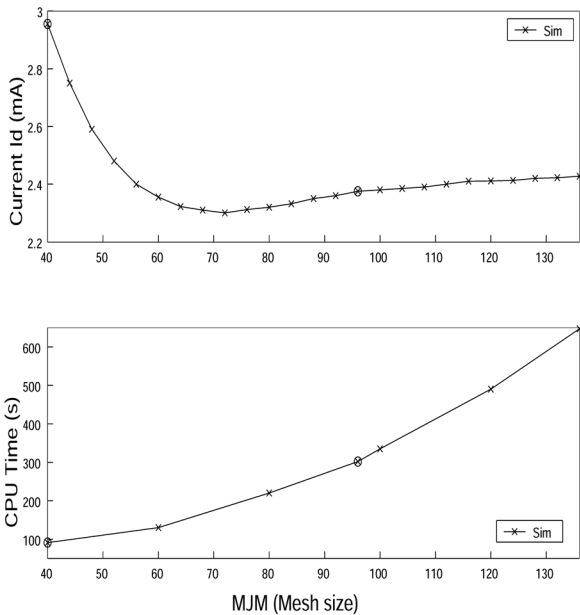


Fig.9. MJM dependence for $I_d(mA)$, CPU time(s).

Table 19. Current I_d simulation for MJM (CPU(s), T_{nmax} (K), $E_y(0)$ ($\frac{V}{0.1\mu m}$))

MJM	N	$I_d(mA)$	CPU	T_{nmax}
40	48339	2.96[22%]	91[1]	2014
96	278783	2.37[2%]	302[3]	2185
136	559503	2.43	647[7]	2262

MJM	N	$E_y(0)$
40	48339	6.94
96	278783	7.62
136	559503	7.93

シミュレーション場 Fig.8 における 1 節点 $i(A)$ を取ると、Fig.10 となる。節点 i に対して、解: ψ_i, n_i, p_i を割り当て、その解と十字に隣り合う 5 点 (ノイマン近傍) だけを離散化に際して考える。縦方向の節点数が $M1$ なので、 $m=M1$ として、必ず右隣の節点は、 $i+m$ 、左隣りは $i-m$ 、上は $i+1$ 、下は $i-1$ となる。したがって、横方向の格子列番号を j 列、縦方向の格子行番号を k 行とすれば、節点番号 i は、

$$i = M1 \times (j-1) + k$$

と表わせる。面キャリア温度 $T_{n,p,i}$ 、モビリティ $\mu_{n,p,i}$ 、ドーピング濃度 N_d, N_a, GR 項は、密度を面 $\square ABCD$ で与え、代表点 P を使って、 T_{nP} などと表記し、離散化の時には、格子点上の値か面で与えた値か厳密に注意して離散化する。左下面 ($\square ABCD$) の面温度 T_{nP} は配列 $TN(i)$ に格納し、それぞれ他の右下面、右上面、左上面は $TN(i+m)$ 、 $TN(i+m+1)$ 、 $TN(i+1)$ に格納する。

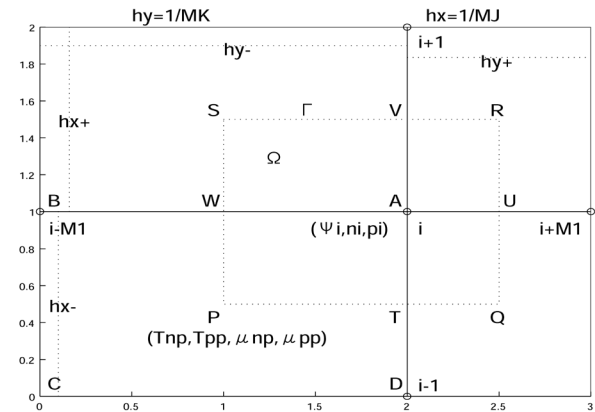


Fig.10. Mesh for CV method (Control Volume).

離散化時に、CV 法の基本式となる積分方程式 (例えば式 (0.70)) の領域 Ω は、Fig.10 の点線で囲む $\square SPQR$ の面内となり、表面 Γ は、その 4 辺となる。積分区間に使う、離散間隔: x 方向の h_{x+}, h_{x-} 、 y 方向の h_{y+}, h_{y-} (不均等あみ目) は、離散分割数の精しさ: $h_{x+} = \frac{1}{MK_{x+}}, h_{y-} = \frac{1}{MJ_{y-}}$ 等から求まる。電極上にある節点 i は、Fig.10 の領域の半分になるので、そのように積分する。電極は、固定境界条件で離散化し、両サイドは、フラックスが 0 ($div[\mathbf{J}_n^D] = 0$ 等) のノイマン境界条件で離散化する。

ガンメル反復とポアソンの線形化 (CV 法)

シミュレーションの際には、全体の反復計算スキームにより全体的に各方程式 (0.1)(0.2)(0.3) の連立方程式を収束させる。この収束のための全体の反復計算スキームはガンメルが見出して、ガンメル反復と呼ばれ、do while のプログラムの書法で示せば Fig.11

のような反復に従う。本報告で全体の収束判定は、解いた $\psi^{(k+1)}, n^{(k+1)}, p^{(k+1)}$ をポアソン方程式に代入した残差で行っており、単に電位 ψ などの前段との差： $|\psi^{(k+1)} - \psi^{(k)}| / |\psi^{(k+1)}|$ だけを見て収束を判断する事はしない。

<ガンメル反復アルゴリズム>

初期値 $\psi^{(0)}, n^{(0)}, p^{(0)}, \nu_n(T_n)^{(0)}, \nu_p(T_p)^{(0)}$ を用意;
 $\mathbf{k} = \mathbf{0}$; (この初期値が収束のよし悪しを決める.)

do while ($\| \text{div}(-\epsilon \nabla \psi^{(k)}) - e(p^{(k)} - n^{(k)} + C) \| \geq \text{EPSNO} \times \| e(p^{(k)} - n^{(k)} + C) \|$) {
 (ここで $\text{EPSNO} = 2.0 \cdot 10^{-3}$ とする.)

solve $\psi^{(k+1)}$; (ガンメルの線形化をしポアソン式 (0.1) を解く.)

$$[\text{div}(-\epsilon \nabla) + e(\nu_p p^{(k)} + \nu_n n^{(k)})] \psi^{(k+1)} = e(\nu_p p^{(k)} + \nu_n n^{(k)}) \psi^{(k)} + e(p^{(k)} - n^{(k)} + C)$$

$E^{(k+1)}(\psi^{(k+1)})$, $\mu_{n,p}^{(k+1)}(E^{(k+1)})$ を更新;
 $\nu_{n,p}^{(k+1)}(\mu_{n,p}^{(k+1)})$ を計算;

$$\nu_{n,p}^{(k+1)} = U_{T_0}^{-1} \left[1 + \gamma'_T \left(\frac{\mu_{n,p}^{(k+1)}}{LISF^{(k+1)}} - 1 \right) \right]^{-1}$$

solve $n^{(k+1)}(\nu_n^{(k+1)})$; (電流連続式 (0.2) を解く.)

$$\left[\text{div} \left(-\frac{\mu_n^{(k+1)}}{\nu_n^{(k+1)}} \nabla + \mu_n^{(k+1)} \nabla \psi^{(k+1)} \right) \right] n^{(k+1)} = GR^{(k)}$$

solve $p^{(k+1)}(\nu_p^{(k+1)})$; (電流連続式 (0.3) を解く.)

$$\left[\text{div} \left(-\frac{\mu_p^{(k+1)}}{\nu_p^{(k+1)}} \nabla - \mu_p^{(k+1)} \nabla \psi^{(k+1)} \right) \right] p^{(k+1)} = GR^{(k)}$$

$J_n^{(k+1)}, J_p^{(k+1)}, GR^{(k+1)}, Id$ の計算;

k = k + 1 } end do while

Fig.11 Gummel convergence scheme

このガンメル反復の全体の収束回数 kcount は CPU 時間に反映し、ガンメル反復のよし悪しに大きく関係し、悪い初期値では収束しないことがある。実務的には、

1. あらかじめ、解に近い初期値を作る。
2. 順バイアス値を段階的に少しずつ上げて初期値の良いものを作っていく。

3. 多くの場合、まず所望の半分の粗いあみ目で収束判定値も荒くして初期値を作り、それを元にあみ目を倍にした初期値で収束を行なう「2段階あみ目法」が、直接初めから所望のあみ目で反復するよりもかえって CPU 短縮になり有効であることを村田が確認している。

全体のガンメル反復の収束判定は、 $\text{EPSNO} = 2.0 \cdot 10^{-3}$ で行ない、ポアソン方程式およびキャリア n, p の移流拡散方程式をそれぞれ、Table 18 の準ニュートン反復収束判定値により CV 法で解き、新しい反復値： $\psi^{(k+1)}, n^{(k+1)}, p^{(k+1)}, \nu_{n,p}(T_{n,p}^{(k+1)})$ を更新していく。ポアソン方程式を解いて求まった $\psi^{(k+1)}$ と $n^{(k)}, p^{(k)}$ を使い、 $n^{(k+1)}, p^{(k+1)}$ を解き、新しい $\psi^{(k+1)}, n^{(k+1)}, p^{(k+1)}$ を使い右辺の GR 項、キャリア温度 $\nu_{n,p}^{(k+1)}$ を計算し全体を反復していく (Fig.11)。全体のガンメル反復中における、これらの値の依存関係を整理すると Table 20 となる。Fig.11 のガンメル反復においてこの時、ポアソン方程式 (0.1) は、ガンメルが発明した「線形化」を施して方程式を変形しておかないと、右辺の電子密度 n 、正孔密度 p が、 $e^{\frac{e\psi}{k_B T}}$ の非線形性を持つため数値的に解けない。

Table 20. Iteration: $(k) \rightarrow (k + 1)$ dependency

$(k + 1)$	Eq. : (k) Dependency
$\psi^{(k+1)}$	(0.1) : $\psi^{(k)}, n^{(k)}, p^{(k)}, \nu_n^{(k)}, \nu_p^{(k)}$
$\mu_{n,p}^{(k+1)}$	(0.22,23) : $\psi^{(k+1)}, n^{(k)}, p^{(k)}, \nu_n^{(k)}, \nu_p^{(k)}$
$\nu_{n,p}^{(k+1)}$	(0.19) : $\mu_{n,p}^{(k+1)}$
$n^{(k+1)}$	$n^{(k)}, \psi^{(k+1)}, \nu_n^{(k+1)}, \mu_n^{(k+1)}, GR^{(k)}$
$p^{(k+1)}$	$p^{(k)}, \psi^{(k+1)}, \nu_p^{(k+1)}, \mu_p^{(k+1)}, GR^{(k)}$
$GR^{(k+1)}$	(0.74) : $n^{(k+1)}, \psi^{(k+1)}, J_{n,p}^{(k+1)}, p^{(k+1)}$

拡散系の方程式をもつ、ポアソン方程式 (0.1) のガンメルの線形化についてふれておく。ポアソン方程式 (0.1) は、電位 ψ について、

$$(0.78) \quad \mathbf{A}\psi = \mathbf{F}$$

の形に CV 法により離散化できる (後述)。しかし、右辺 \mathbf{F} に当たる $e(p - n - Na + Nd)$ の中にある電荷 p や n が、 $e^{\frac{e\psi}{k_B T}}$ の形の非線形性を持つために、式 (0.1) をそのまま離散化しても収束しない。

そこで、Newton 反復の方法を取り入れ式 (0.1) を

$$(0.79) \quad \text{div}[-\epsilon \nabla \psi^{(k)}] = \mathbf{F}_0 + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \psi} \delta;$$

$$\psi^{(k)} - \psi^{(k-1)} = \delta, \quad \mathbf{F}_0 = e(p - n - Na + Nd)$$

として、次式:

$$(0.80) \quad \text{div}[-\epsilon \nabla \psi^{(k)}] - \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \psi} \psi^{(k)} = \mathbf{F}_0 - \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \psi} \psi^{(k-1)};$$

$$\frac{\partial F}{\partial \psi} = -e \cdot \frac{e}{kT} (p^{(k)} + n^{(k)})$$

に基づいて離散化すれば、収束する。これは、天才 Gummel が最初に発見した。式 (0.81) は、

$$(0.81) [\text{div}(-\epsilon \nabla) + e(\nu_p p^{(k)} + \nu_n n^{(k)})] \psi^{(k+1)} = e(\nu_p p^{(k)} + \nu_n n^{(k)}) \psi^{(k)} + e(p^{(k)} - n^{(k)} + C)$$

と整理できる。もちろん我々は、前式 (0.80) を CV 法にしたがい積分形で離散化する。

$$(0.82) \int_{\Gamma} (-\epsilon \nabla \psi^{(k)}) \cdot \mathbf{ndS} - \int_{\Omega} \frac{\partial F}{\partial \psi} \psi^{(k)} d\mathbf{V} = \int_{\Omega} (\mathbf{F}_0 - \frac{\partial F}{\partial \psi} \psi^{(k-1)}) d\mathbf{V}$$

この左辺第 2 項は、 ψ_i の対角項に加わり行対角優性を増し、解きやすい方向に働く。

Table 21. Iteration step(MJM=40,V = 0.6(V))

	kcount(quasi-Newton)	Internal
Gummel	57	
ψ	57	316
n	57	5497
p	57	4817

Table 22. EPSNO kcount(MJM=40,V = 0.6(V))

EPSNO	$I_d(\text{mA})$	kcount
*1	2.95981	57
*32	2.96008(0.009 %)	22
*64	2.96091(0.037 %)	16
*128	2.99596(1.221 %)	11

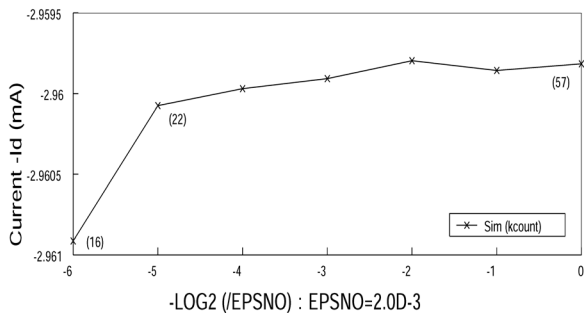


Fig.12. Convergence (64×EPSNO→EPSNO).

今、Fig.11 のガンメル反復の中で、ポアソン方程式およびキャリア n, p の移流拡散方程式をそれぞれ解くための内部計算における準ニュートン反復の回数は、それぞれ 1 回で収束する。離散化の精しさ MJM が 40 系列のとき、順バイアス $V = 0.6(\text{V})$ の場合に、ガンメル反復は 57 回、CPU 時間は 91(s) で収束する。収束までのそれぞれのソルバにおける

内部探索反復の総合計を Table 21 に示す。非対称行列となる移流拡散方程式は、対称行列となるポアソン行列に比べ約 15 倍ほど内部反復回数が増える。

このとき、全体のガンメル反復収束判定値を $\text{EPSN} = 2.0 \cdot 10^{-3}$ として、EPSNO の倍数 (×32, ×64, ×128 等) で途中経過の収束状況を見ると、Fig.12 および Table 22 となる。Fig.12 の横軸は、 $-\log_2(\text{EPSNO の倍数})$ としたので、左端が粗い収束を表わす。Fig.12 によれば、素直に $32 \times \text{EPSNO}$ から解に収束してきていることが分かる。EPSN = $2.0 \cdot 10^{-3}$ が精度的にも妥当であることが分かる。

収束回数についての実務上の知恵がある。今は、印加する順バイアス V を、 $\psi_N^V = \psi_N - V (> 0)$ として、ドーピングが濃い空乏層幅が極端に狭い N 側 (安定側) に境界条件を与えている。しかし、境界条件としては空乏層幅の広い P 側に対して $\psi_P^V = \psi_P + V (> 0)$ としても同じである。このとき確かに Table 23 のように、N 側電極の電子電流値 I_d としては、順バイアスを与える境界条件をどちらに変えても 0.0005 % の差しかなく結果は同じであるが、P 側にバイアス設定の方がガンメル反復 (kcount) が 1.47 倍増え、CPU 時間も 1.2 倍となる。電位 ψ の安定側の N 側にバイアス設定を掛けた方が、数値シミュレーション上、有利である。次に、それぞれの方程式を解く離散化法：CV 法について論ずる。

Table 23. Simulation by bias boundary condition

condition	$I_d(\text{mA})$	kcount	CPU(s)
$\psi_N^V = \psi_N - V$	2.9598	57	91
$\psi_P^V = \psi_P + V$	2.9598	84(1.5)	107(1.2)

中心差分による CV 法

$$(0.83) \text{div}[-\kappa \nabla u + \mu \mathbf{b}u] = f$$

の形の移流拡散方程式の場合で説明する。電子 n キャリアの場合には、 $\kappa = D_n$, $\mathbf{b} = (\nabla \psi)$ に対応している。 $\mathbf{b} = \mathbf{0}$ とすれば、熱方程式やポアソン方程式と同型の単に拡散方程式となる。この拡散系の現象のモデル化のために、拡散方程式を村田流に CV 法に基づき積分保存則を満足するように差分化すれば、対称行列になるのでソルバには ICCG 法の反復法を使う。 $\mathbf{b} \neq \mathbf{0}$ の移流項が入ると、差分化した行列は非対称になるので、ICCG 法は使えず BCG 法のソルバを使うことになる。この移流項が入るだけで、だんぜん解きづらくなり CPU 時間も 3 倍かかる。離散方程式が安定に解けるように仕向けるためには、あみ目サイズが関係するセルペクレ数への対応がやっ

かいとなるが、決定版として指数法(指数差分)があり、半導体デバイスの分野では、Schafetter Gummel法として呼ばれている。このとき、対称行列で使う中心差分では、離散方程式が安定に解けない。

CV法では、微分形の式(0.83)の元の、保存則を満足する積分方程式：

$$(0.84) \int_{\Gamma} (-\kappa \nabla u + \mu b u) \cdot \mathbf{n} d\mathbf{S} = \int_{\Omega} f dV$$

が原点となる。中心差分において、隣りあう格子点上の u_h 値と u_0 値において、式(0.84)の線積分を離散化するとき、

$$(0.85) \nabla u \text{ を } \frac{u_h - u_0}{h}, \quad u \text{ を } \frac{u_h + u_0}{2}$$

と置き換えるのが、中心差分の本質である。非対称な行列が中心差分でも行対角優位になればよいが、セルベクレ数(移流項と拡散項の係数の比にあみ目幅 h)を掛けたもの)：

$$\frac{\mu b h}{\kappa} \text{ が、2 を 超 える}$$

と行対角優位にならず、精度的に不安定になり、指数法が是非とも必要になる。保存則を満足するように差分化する本質として、電極に沿って線積分した電流値が、シミュレーション結果でも 0.001% 以下の精度で物理的に保存することは既に見た。

中心差分による、式(0.84)の離散化の手順を説明する。Fig.10の小領域 PQRS の回りに、左辺は、

$$(0.86) \int_{\Gamma} (-\kappa \nabla u + \mu b u) \cdot \mathbf{n} ds = \int_{PQ} + \int_{QR} + \int_{RS} + \int_{SP}$$

となり、

$$(0.87) \int_{PQ} \doteq \left(-d_P \left(\frac{u_i - u_{i-1}}{h y_-} \right) + \mu_P \cdot b_y \left(\frac{u_i + u_{i-1}}{2} \right) \right) \cdot (-1) \frac{h x_-}{2} + \left(-d_Q \left(\frac{u_i - u_{i-1}}{h y_-} \right) + \mu_Q \cdot b_y \left(\frac{u_i + u_{i-1}}{2} \right) \right) \cdot (-1) \frac{h x_+}{2}$$

などとして書き下す。ここで、T 点での $\frac{\partial u}{\partial y}$ は $\frac{u_i - u_{i-1}}{h y_-}$ 、同様に u_i は $\frac{u_i + u_{i-1}}{2}$ 、W 点での $\frac{\partial u}{\partial x}$ は $\frac{u_i - u_{i-m}}{h x_-}$ 、同様に u_i は $\frac{u_i + u_{i-m}}{2}$ 、などと、各点での u_i を使って差分化している。これらの置き換えが、中心差分の要である。また、伝導度 $\kappa(x, y)$ と移動度 $\mu(x, y)$ は、メッシュで区分けた面内は一定と考えて差分化する。たとえば、P 点

での $\kappa(x, y) \equiv d_P$ および、 $\mu(x, y) \equiv \mu_P$ は、4 点 $i, i - m, i - m - 1, i - 1$ が囲む面内一定値として、プログラムレベルでは DF(i) に格納するなど工夫する。配列 DF の範囲は、DF(N+M) まで必要となる。

式(0.87)のように、式(0.86)の右辺 4 項全部を書き下だし、 $u_{i-m}, u_{i-1}, u_i, u_{i+1}, u_{i+m}$ 項毎に整理すれば、第 i 番(格子点番号)方程式：

$$(0.88) a_{i,i-m} u_{i-m} + a_{i,i-1} u_{i-1} + a_{i,i} u_i + a_{i,i+1} u_{i+1} + a_{i,i+m} u_{i+m} = f_i$$

ができる。この時、式(0.88)の左辺の係数は、次式となる。

$$(0.89) a_{i,i} = \frac{1}{2} \left[d_P \frac{h x_-}{h y_-} \left(1 - \frac{\mu_P b_y h y_-}{2 d_P} \right) \right] + \frac{1}{2} \left[d_Q \frac{h x_+}{h y_-} \left(1 - \frac{\mu_Q b_y h y_-}{2 d_Q} \right) \right] + \frac{1}{2} \left[d_Q \frac{h y_-}{h x_+} \left(1 + \frac{\mu_Q b_x h x_+}{2 d_Q} \right) \right] + \frac{1}{2} \left[d_R \frac{h y_+}{h x_+} \left(1 + \frac{\mu_R b_x h x_+}{2 d_R} \right) \right] + \frac{1}{2} \left[d_R \frac{h x_+}{h y_+} \left(1 + \frac{\mu_R b_y h y_+}{2 d_R} \right) \right] + \frac{1}{2} \left[d_S \frac{h x_-}{h y_+} \left(1 + \frac{\mu_S b_y h y_+}{2 d_S} \right) \right] + \frac{1}{2} \left[d_S \frac{h y_+}{h x_-} \left(1 - \frac{\mu_S b_x h x_-}{2 d_S} \right) \right] + \frac{1}{2} \left[d_P \frac{h y_-}{h x_-} \left(1 - \frac{\mu_P b_x h x_-}{2 d_P} \right) \right] a_{i,i-m} = -\frac{1}{2} \left[d_S \frac{h y_+}{h x_-} \left(1 + \frac{\mu_S b_x h x_-}{2 d_S} \right) \right] - \frac{1}{2} \left[d_P \frac{h y_-}{h x_-} \left(1 + \frac{\mu_P b_x h x_-}{2 d_P} \right) \right] a_{i,i-1} = -\frac{1}{2} \left[d_P \frac{h x_-}{h y_-} \left(1 + \frac{\mu_P b_y h y_-}{2 d_P} \right) \right] - \frac{1}{2} \left[d_Q \frac{h x_+}{h y_-} \left(1 + \frac{\mu_Q b_y h y_-}{2 d_Q} \right) \right] a_{i,i+1} = -\frac{1}{2} \left[d_R \frac{h x_+}{h y_+} \left(1 - \frac{\mu_R b_y h y_+}{2 d_R} \right) \right] - \frac{1}{2} \left[d_S \frac{h x_-}{h y_+} \left(1 - \frac{\mu_S b_y h y_+}{2 d_S} \right) \right] a_{i,i+m} = -\frac{1}{2} \left[d_Q \frac{h y_-}{h x_+} \left(1 - \frac{\mu_Q b_x h x_+}{2 d_Q} \right) \right] - \frac{1}{2} \left[d_R \frac{h y_+}{h x_+} \left(1 - \frac{\mu_R b_x h x_+}{2 d_R} \right) \right]$$

ここで、係数 $a_{i,t}$ は、行列 $\mathbf{A}(a_{i,t})$ の要素と対応しており、行 i は Fig.8 の場の格子点番号 $i (= m \times (j - 1) + k; j = 1, M2, k = 1, m : m = M1)$ を表わす。Fig.8 では、 \mathbf{A} の行列サイズは： $N=M2(x$ 方向) $\times m(y$ 方向)： $m=M1$ となる。均等あみ目の場合には、 $hx_{\pm} = hy_{\pm}$ となる。なお、 \mathbf{b} が場に依る量であれば、例えば $\mu_Q b_x hx_{+}$ の b_x は、

$$b_x^U = \frac{b_{i+m} + b_i}{2} \text{ として、 } \mathbf{b} = (\nabla\psi) \text{ ならば、}$$

$$b_x^U = \frac{\psi_{i+m} - \psi_i}{hx_{+}} \text{ として、}$$

$\mu_Q b_x^U hx_{+}$ に置き変わる。この行列 \mathbf{A} は、 $a_{i,i-m}, a_{i,i-1}, a_{i,i}, a_{i,i+1}, a_{i,i+m}$ の要素を持つ帯行列で非対称行列であり、非対称用の反復法ソルバ (BCGSTB が最高) が必要となる。 $\mathbf{b}=(b_x, b_y)=(0,0)$ とすれば、元の微分方程式は単に拡散方程式となり、それを CV 法で離散化した行列 (係数 a において $b_x = b_y = 0$ とする) は対称帯行列となり、対称行列用ソルバが使い解き易くなり、CPU 時間も非対称帯行列に比べ $\frac{1}{3}$ に短縮する。

ここで、離散化方程式 (i 番方程式) が安定に解けるように仕向けるためには、次の条件を課す。

すべての節点 i につき、

$$a_i > 0 \text{ かつ } a_{i\pm 1} \leq 0, a_{i\pm m} \leq 0$$

となるようにせよ。そのためには、係数 a に現れる、すべての $1 \pm \frac{\mu b h}{2\kappa}$ の形の式が > 0 すなわち、

$$(0.90) \left| \frac{\mu b_x h_x}{\kappa} \right| \leq 2, \quad \left| \frac{\mu b_y h_y}{\kappa} \right| \leq 2$$

が成立するように、あみ目を細かくすればよい。この x, y 方向の $\left| \frac{\mu b_x h_x}{\kappa} \right|, \left| \frac{\mu b_y h_y}{\kappa} \right|$ を、それぞれ x, y 方向の「セルペクレ数」と言う。セルペクレ数は、移流項と拡散項の係数の比にあみ目幅 (h) を掛けたものになっている。このセルペクレ数を 2 以下におさえないと、トラブルが生じる事が昔から知られている (非対称の場合の問題の 1 つ)。セルペクレ数が 2 を大巾に超える場合は、中心差分では精度的に不安となる。そのような状況の下では、いわば決定版として、差分にこれまでの中心差分ではなく、指数差分 (指数法) が必須となる。セルペクレ数が 2 を超える場合、指数法を使わなければ解が振動して求まらない場合があり、そのトラブルの簡単な例を付録 1 に示しておく。

式 (0.84) の右辺の面積分: f_i (式 (0.88) の右辺) は、Fig.10 の面 S、面 R、面 P、面 Q で与えられる熱源等の f_P, f_Q, f_R, f_S が分かっている場合には、節点 i での f_i は次式となる。

$$(0.91) f_i = \int_{\Omega} f \, dv = f_P \frac{hx_{-} hy_{-}}{2} + f_Q \frac{hx_{+} hy_{-}}{2}$$

$$+ f_R \frac{hx_{+} hy_{+}}{2} + f_S \frac{hx_{-} hy_{+}}{2} \left(\frac{\text{cal}}{\text{sec}} \right)$$

また、上の P 側電極の離散化は、Fig.10 の上側がないので、CV 領域としては下半分の積分領域になる。

式 (0.88) は、 $a_{i,i-m}, a_{i,i-1}, a_{i,i}, a_{i,i+1}, a_{i,i+m}$ 成分をもつ、5 本の帯行列となり、最終的に、

$$\mathbf{A}(a_{i,j}) \cdot \mathbf{U}(u_j) = \mathbf{F}(f_i)$$

という行列方程式を解くことになる。たとえば、Fig.8 の N 側電極上にある節点 1 上においては、境界条件を u_N とすると、

$$a_{i,i} = 1.0, a_{i,i-m} = a_{i,i-1} = a_{i,i+1} = a_{i,i+m} = 0.0, f_i = 0.0$$

として除き、上の節点 2 においては、 $i = 2$ とすると、 $i - 1$ が固定境界になるので、 $a_{i,i-1} = 0$ として右辺の f_i に $a_{i,i-1} u_N$ を移項して、右辺を $f_i - a_{i,i-1} u_N$ と変えて対応する。また左側の $flux = 0$ のノイマン境界については、左係数 $a_{i,i-m}$ において、 $d_i = d_{i+1} = \mu_i = \mu_{i+1} = 0$ とする。

指数差分 (指数法) による CV 法

これまで見たように、セルペクレ数が 2 を超えるような問題で必須となる、指数法に基づく離散化について、次に説明する。

$div(-d\nabla u + \mu b u) = f$ (例えば、 $d = \kappa, \mathbf{b} = \nabla\psi$) を相手にする。この式の x 成分を考え、 $\frac{d}{dx}(-d\frac{du}{dx} + \mu b u) = 0, u(0) = u_0, u(h) = u_h$ とすると、 $\omega = \frac{\mu b}{d}$ とおく時、

$$(0.92) u(x) = u_0 + (u_h - u_0) \frac{\exp(\omega x) - 1}{\exp(\omega h) - 1}$$

の解析解がある。この式から、flux を計算すると、

$$(0.93) -d \frac{du}{dx} + \mu b u = \mu b \left[u_0 - \frac{u_h - u_0}{\exp(\omega h) - 1} \right]$$

$$= \mu b \left[u_0 - \frac{(u_h - u_0) B(\omega h)}{\omega h} \right]$$

ここで、 $B(z)$ はベルヌーイ関数で、

$$B(z) = \frac{z}{e^z - 1}, \quad 1 + \frac{B(z)}{z} = \frac{B(-z)}{z}$$

この flux を使って、前掲の Fig.10 の小領域 PQRS の周囲を γ に見立てて、移流拡散系の熱方程式 (積分系) :

$$(0.94) \int_{\Gamma} (-d\nabla u + \mu b u) \cdot \mathbf{n} \, ds = \int_{\Omega} f \, dv$$

の CV 法による離散式を作る。左辺の線積分は次式のように細分化できる。

$$(0.95) \int_{\Gamma} (-d\nabla u + \mu b u) \cdot \mathbf{n} \, ds = \int_{PQ} + \int_{QR}$$

+ \int_{RS} + \int_{SP}
 係数 d, μ, \mathbf{b} などが、もっと場に精しく依る時には、

$$\int_{PQ} = \int_{PT} + \int_{TQ}$$

等、積分範囲を精しく分ける。右辺の面積分は純拡散の場合(式(0.91))と同様に次式として始末し、節点 i での f_i を求める。

$$(0.96) f_i = \int_{\Omega} f dv = f_P \frac{hx_-}{2} \frac{hy_-}{2} + f_Q \frac{hx_+}{2} \frac{hy_-}{2} + f_R \frac{hx_+}{2} \frac{hy_+}{2} + f_S \frac{hx_-}{2} \frac{hy_+}{2} \quad \left(\frac{\text{cal}}{\text{sec}} \right)$$

すべての左辺の線積分は、 $\omega_{Py} = \frac{\mu_P b_y^T}{d_P}$, $\omega_{Px} = \frac{\mu_P b_x^W}{d_P}$ などとして次のように書ける。(d_P, μ_P は、点 P を中点とする面 $\square u_i u_{i-m} u_{i-m-1} u_{i-1}$ の拡散係数(d)と、移動度(μ)を表わし、 b_y^T は、境界 PQ を流れる移流ベクトル: $\mathbf{b} = (b_x^T \ b_y^T)^T$ の y 成分を表わす。)

$$(0.97) \int_{PQ} = \int_{PT} + \int_{TQ} = \mu_P b_y^T \left[u_{i-1} - \frac{u_i - u_{i-1}}{\exp(\omega_{Py} hy_-) - 1} \right] \cdot [0 \ -1]^T \frac{hx_-}{2} + \mu_Q b_y^T \left[u_{i-1} - \frac{u_i - u_{i-1}}{\exp(\omega_{Qy} hy_-) - 1} \right] \cdot [0 \ -1]^T \frac{hx_+}{2} = -\mu_P b_y^T \left[u_{i-1} - \frac{(u_i - u_{i-1})B(\omega_{Py} hy_-)}{\omega_{Py} hy_-} \right] \cdot \frac{hx_-}{2} - \mu_Q b_y^T \left[u_{i-1} - \frac{(u_i - u_{i-1})B(\omega_{Qy} hy_-)}{\omega_{Qy} hy_-} \right] \cdot \frac{hx_+}{2}$$

$$(0.98) \int_{QR} = \int_{QU} + \int_{UR} = \mu_Q b_x^U \left[u_i - \frac{u_{i+m} - u_i}{\exp(\omega_{Qx} hx_+) - 1} \right] \cdot [1 \ 0]^T \frac{hy_-}{2} + \mu_R b_x^U \left[u_i - \frac{u_{i+m} - u_i}{\exp(\omega_{Rx} hx_+) - 1} \right] \cdot [1 \ 0]^T \frac{hy_+}{2} = \mu_Q b_x^U \left[u_i - \frac{(u_{i+m} - u_i)B(\omega_{Qx} hx_+)}{\omega_{Qx} hx_+} \right] \cdot \frac{hy_-}{2} + \mu_R b_x^U \left[u_i - \frac{(u_{i+m} - u_i)B(\omega_{Rx} hx_+)}{\omega_{Rx} hx_+} \right] \cdot \frac{hy_+}{2} = [\mu_Q b_x^U u_i - d_Q \frac{(u_{i+m} - u_i)}{hx_+} B(\omega_{Qx} hx_+)] \cdot \frac{hy_-}{2} + [\mu_R b_x^U u_i - d_R \frac{(u_{i+m} - u_i)}{hx_+} B(\omega_{Rx} hx_+)] \cdot \frac{hy_+}{2}$$

ここで、 $\omega_{Qx} = \frac{\mu_Q b_x^U}{d_Q}$, $\omega_{Rx} = \frac{\mu_R b_x^U}{d_R}$, $\nu_Q = \frac{\mu_Q}{d_Q}$

$$(0.99) \int_{RS} = \int_{RV} + \int_{VS} =$$

$$\mu_R b_y^V \left[u_i - \frac{u_{i+1} - u_i}{\exp(\omega_{Ry} hy_+) - 1} \right] \cdot [0 \ 1]^T \frac{hx_+}{2} + \mu_S b_y^V \left[u_i - \frac{u_{i+1} - u_i}{\exp(\omega_{Sy} hy_+) - 1} \right] \cdot [0 \ 1]^T \frac{hx_-}{2} = \mu_R b_y^V \left[u_i - \frac{(u_{i+1} - u_i)B(\omega_{Ry} hy_+)}{\omega_{Ry} hy_+} \right] \cdot \frac{hx_+}{2} + \mu_S b_y^V \left[u_i - \frac{(u_{i+1} - u_i)B(\omega_{Sy} hy_+)}{\omega_{Sy} hy_+} \right] \cdot \frac{hx_-}{2}$$

$$(0.100) \int_{SP} = \int_{SW} + \int_{WP} = \mu_S b_x^W \left[u_{i-m} - \frac{u_i - u_{i-m}}{\exp(\omega_{Sx} hx_-) - 1} \right] \cdot [-1 \ 0]^T \frac{hy_+}{2} + \mu_P b_x^W \left[u_{i-m} - \frac{u_i - u_{i-m}}{\exp(\omega_{Px} hx_-) - 1} \right] \cdot [-1 \ 0]^T \frac{hy_-}{2} = -\mu_S b_x^W \left[u_{i-m} - \frac{(u_i - u_{i-m})B(\omega_{Sx} hx_-)}{\omega_{Sx} hx_-} \right] \cdot \frac{hy_+}{2} - \mu_P b_x^W \left[u_{i-m} - \frac{(u_i - u_{i-m})B(\omega_{Px} hx_-)}{\omega_{Px} hx_-} \right] \cdot \frac{hy_-}{2}$$

以上の式から、式(0.95)の右辺の線積分4項全部を書き下だし、 $u_{i-m}, u_{i-1}, u_i, u_{i+1}, u_{i+m}$ 項毎に整理すれば、第 i 番(格子点番号)方程式:

$$(0.101) a_{i,i-m} u_{i-m} + a_{i,i-1} u_{i-1} + a_{i,i} u_i + a_{i,i+1} u_{i+1} + a_{i,i+m} u_{i+m} = f_i$$

ができる。この時、式(0.101)の左辺の係数は、次式となる。

$$(0.102) a_{i,i} = \frac{1}{2} \left[d_P \frac{hx_-}{hy_-} B(\omega_{Py} hy_-) \right] + \frac{1}{2} \left[d_Q \frac{hx_+}{hy_-} B(\omega_{Qy} hy_-) \right] + \frac{1}{2} \left[d_Q \frac{hy_-}{hx_+} B(-\omega_{Qx} hx_+) + d_R \frac{hy_+}{hx_+} B(-\omega_{Rx} hx_+) \right] + \frac{1}{2} \left[d_R \frac{hx_+}{hy_+} B(-\omega_{Ry} hy_+) + d_S \frac{hx_-}{hy_+} B(-\omega_{Sy} hy_+) \right] + \frac{1}{2} \left[d_S \frac{hy_+}{hx_-} B(\omega_{Sx} hx_-) + d_P \frac{hy_-}{hx_-} B(\omega_{Px} hx_-) \right] a_{i,i-m} = -\frac{1}{2} \left[d_S \frac{hy_+}{hx_-} B(-\omega_{Sx} hx_-) \right] - \frac{1}{2} \left[d_P \frac{hy_-}{hx_-} B(-\omega_{Px} hx_-) \right] a_{i,i-1} = -\frac{1}{2} \left[d_P \frac{hx_-}{hy_-} B(-\omega_{Py} hy_-) \right] - \frac{1}{2} \left[d_Q \frac{hx_+}{hy_-} B(-\omega_{Qy} hy_-) \right]$$

$$a_{i,i+1} = -\frac{1}{2} \left[d_R \frac{hx_+}{hy_+} B(\omega_{Ry} hy_+) \right] - \frac{1}{2} \left[d_S \frac{hx_-}{hy_+} B(\omega_{Sy} hy_+) \right]$$

$$a_{i,i+m} = -\frac{1}{2} \left[d_Q \frac{hy_-}{hx_+} B(\omega_{Qx} hx_+) \right] - \frac{1}{2} \left[d_R \frac{hy_+}{hx_+} B(\omega_{Rx} hx_+) \right]$$

$$\omega_{Ry} = \frac{\mu_R b_y^V}{d_R}, \quad \omega_{Sy} = \frac{\mu_S b_y^V}{d_S}, \quad \omega_{Qx} = \frac{\mu_Q b_x^U}{d_Q}, \quad \omega_{Rx} = \frac{\mu_R b_x^U}{d_R}, \quad \omega_{Py} = \frac{\mu_P b_y^T}{d_P}, \quad \omega_{Qy} = \frac{\mu_Q b_y^T}{d_Q},$$

$$\omega_{Sx} = \frac{\mu_S b_x^W}{d_S}, \quad \omega_{Px} = \frac{\mu_P b_x^W}{d_P}, \quad \nu_R = \frac{\mu_R}{d_R}, \quad \nu_S = \frac{\mu_S}{d_S}, \quad \nu_Q = \frac{\mu_Q}{d_Q}, \quad \nu_P = \frac{\mu_P}{d_P} \text{ など。}$$

(ここで、Fig.10 の境界 PQ を流れる移流ベクトル: $\mathbf{b} = (b_x^T \ b_y^T)^T$, 境界 RS を流れる $\mathbf{b} = (b_x^V \ b_y^V)^T$, 境界 SP を流れる $\mathbf{b} = (b_x^W \ b_y^W)^T$, 境界 QR を流れる $\mathbf{b} = (b_x^U \ b_y^U)^T$ を使った。)

ここで、係数 $a_{i,t}$ は、行列 $\mathbf{A}(a_{i,t})$ の要素と対応しており、行 i は前掲 Fig.8 の場の格子点番号 $i (= m \times (j-1) + k; j = 1, M2, k = 1, m : m = M1)$ を表わす。

例えば、式 (0.102) の係数 $a_{i,i+m}$ の式において、ベルヌーイ関数 $B(z)$ のベキ級数展開式:

$$(0.103) \ B(z) = \frac{z}{e^z - 1} \simeq 1 - \frac{z}{2} + \frac{z^2}{12} - \dots$$

の内、第 2 項まで: $B(z) \simeq 1 - \frac{z}{2}$ を使って代入した式:

$$(0.104) \ a_{i,i+m} = -\frac{1}{2} \left[d_Q \frac{hy_-}{hx_+} \left(1 - \frac{\omega_{Qx} hx_+}{2} \right) \right]$$

$$-\frac{1}{2} \left[d_R \frac{hy_+}{hx_+} \left(1 - \frac{\omega_{Rx} hx_+}{2} \right) \right]$$

は、中心差分式で作った $a_{i,i+m}$ の式 (0.89) と同式となる。中心差分は、指数法の近似式になっている。中心差分で近似できる (セルペクレ数が 2 以下) 範囲で、 $b_y^T = b_y^V$, $b_x^W = b_x^U$, $\nu = \frac{\mu}{d} = C_0$ 一定、 $d = \text{一定}$ 、等間隔 ($hx = hy$) ならば、

$$a_{i,i} = -(a_{i,i-1} + a_{i,i+1} + a_{i,i-m} + a_{i,i+m})$$

となり行対角優位となり得る。行対角優位ならば、 \mathbf{A} が正則で、軸選択なしのガウスで、終りまで LU 分解できるなどの恩恵が期待できる。 $b_y^T \neq b_y^V$, $b_x^W \neq b_x^U$ でも、メッシュを細かくするなどして、ズレ (差) が小さいならば、行対角優位性のズレも小さくなる。

ベルヌーイ関数 $B(z)$ のプログラム上における扱いを説明する。ベルヌーイ関数で、 $z = 0$ は除去可能な特異点で、式 (0.103) のベキ級数展開式から、 $B(0) = 1$ と定義し直す。ベルヌーイ関数の計算は、特異点近辺の狭い範囲では、式 (0.103) を使い、次のような Function BER4(Z) で行なう。

FUNCTION BER4(z)

if ($z < -10^{-2}$) then BER4(z) = $\frac{z}{e^z - 1}$;

if ($-10^{-2} < z < 10^{-2}$) then BER4(z) =

$1 - (0.5 - 0.0833333 \cdot z) \cdot z$;

if ($z > 10^{-2}$) then BER4(z) = $\frac{z \cdot e^{-z}}{1 - e^{-z}}$;

計算精度を上げるため

この指数差分 (Exp): BER4(z) の計算と、中心差分 (Cent): $B_{cent}(z) = 1 - 0.5z$ による計算値の差は、Table 24 のようになる。

Table 24. $B(z)$:Exp and $1 - 0.5z$:Cent for z

z	B(z) :Exp	1-0.5z=Bcent(z) :Cent
-4.0	4.075	3.0
-2.0	2.313	2.0
-1.0	1.582	1.5
-0.5	1.271	1.25(1.6 %)
-0.25	1.130	1.125(0.44 %)
-10^{-2}	1.005	1.005
0.0	1.0	1.0
10^{-2}	0.995	0.995
0.25	0.880	0.875(0.56 %)
0.5	0.771	0.750(0.77 %)
1.0	0.582	0.5
2.0	0.313	0.0
4.0	0.075	-1

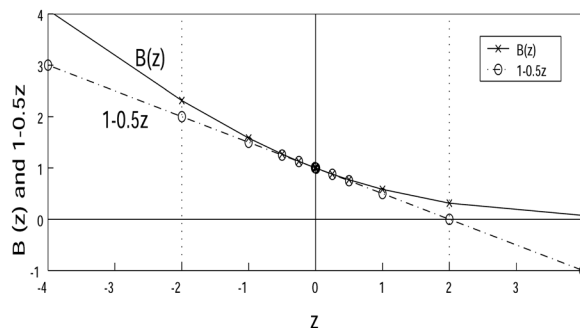


Fig.13. Plot of $B(z)$:Exp and $1 - 0.5z$:Cent

ここで、ベルヌーイ関数 $B(z)$ の引数 z は、例えば y 方向で、 $hy = \frac{1}{MJ}$, $\mathbf{b} = (bx, by)^T$ を使って、

$$z = \omega \cdot hy = \frac{\mu \cdot by}{d} \cdot hy = C_0 \cdot by \cdot hy = \frac{C_0}{MJ} \cdot by$$

=セルペクレ数

となり、 z はセルペクレ数と等しい。Table 24のように、ベルヌーイ関数 $B(z)$ と、中心差分に対応する $B(z) \simeq 1 - 0.5z$ のグラフは、Fig.13 となる。セルペクレ数(絶対値)が2を超える、すなわち $|z|$ が2を超える範囲では、ベルヌーイ関数値と中心差分による値の差は大きく開くことが分かる。

$\text{div}(-d\nabla u + \mu b u) = f$ において、 $b = 0$ により拡散方程式のみの場合は、離散行列が対称行列になり、 $B(z) = \frac{z}{e^z - 1} \simeq 1 - \frac{z}{2}$ と近似すると、指数差分(ベルヌーイ差分)は中心差分となり、対称行列を解く ICCG のソルバが使える(拡散方程式は中心差分が良い)。

また、式(0.101)の i 番方程式における境界条件の反映には、中心差分同様の注意がある。これら係数も、Fig.10の節点 i が上側のノイマン境界の節点である場合には、左辺の積分区間を Fig.10の下半分だけにする必要があり、扱いが異なる。線積分は、Fig.10の $i(A)$ 点が境界上にあるとして、

$$(0.105) \int_{\Gamma_A} (-\kappa \nabla u + \mu b u) \cdot \mathbf{n} \, ds = \int_{WP} + \int_{PQ} + \int_{QU}$$

となり、あとは式(0.97)と同様の手順で離散化して、 i 番方程式に書き下す。このとき、積分区間が下半分になるので、係数 $a_{i,i+1}$ はないことになる。

一般的に、節点 $i(i)$ に隣あう各 $i+1, i-1, i+m, i-m$ のいずれかに、固定境界がある場合には、違った扱いをする必要がある。例えば、Fig.8の上端(P側)の点は固定境界条件となるので、境界上の i 点での固定境界値を、

$$u_i = u_c$$

として、境界上では、離散化係数を、

$$(0.106) a_{i,i} = 1.0, a_{i,i-m} = a_{i,i-1} = a_{i,i+1} \\ = a_{i,i+m} = 0.0 (u_i = u_c)$$

とする。それに連動して、固定境界に隣り合う点 i ($i+1$ の方向に固定境界がある点) については、その点の i 番方程式が、

$$(0.107) a_{i,i-m} u_{i-m} + a_{i,i-1} u_{i-1} + a_{i,i} u_i \\ + a_{i,i+1} u_c + a_{i,i+m} u_{i+m} = f_i$$

となる。この時、未知数項でない $a_{i,i+1} u_c$ は、右辺に移項して f_i の中間に入れる。したがって、

$$+a_{i,i+m} u_{i+m} = f_i - a_{i,i+1} u_c$$

を解くことになるので、係数は、

$$a_{i,i+1} = 0.0$$

$a_{i,i-m}, a_{i,i-1}, a_{i,i}, a_{i,i+m}$ は、式(0.102)と同じ

と設定する。 $u_c = 0$ ならば、なおさら簡単で、右辺に手を加える必要はなくなる。

Fig.8の両側端は、ノイマン境界 ($\text{flux} = 0$) とするので、例えば左側にノイマン境界をもつ節点では、

$$a_{i,i-m} = 0.0 \text{ とした上で、} \text{flux} \text{ を } 0$$

にするために、 $\text{div}(-\kappa \nabla u + \mu b u) = f$ の離散式(0.102)において、 $\kappa = 0, \mu = 0$ としてしまい楽をする。

まとめ

階段接合を仮定した空乏層近似による解析解が、かなり良い近似であることが CV 法による数値シミュレーションの結果と実験測定値を比較することによって明らかにできた。その過程で、電場等、測定できない数値が見える数値シミュレーションは直感的理解の良い道具となり、学生への理解の手助けになると実感した。

特に、階段接合を仮定した空乏層近似では解析できない、逆バイアス時の強電場によるインパクトイオン効果 (p, n 対生成) によるツェナー電流(ドリフト電流による降伏特性) をシミュレーションによって理解することができる。GR 生成消滅項も数値として追えること、電子電流も正孔電流も別々に計算できることによって、現象を直感的に理解できることがシミュレーションの強みであることが明確に示せた。なお、プログラムは FORTRAN 約 5000 ステップで、提供できる。

謝辞

CV 法による数値シミュレーション技法は、村田健郎研究室の研究を引き継いだものである。2009年7月27日に逝去された村田教授に感謝します。また、本田充彦特別助教には貴重なご意見をいただきました。ここに感謝いたします。

文献

- 1) 青木 孝 (1995) n-MOS デバイス数値シミュレーションの基本技法. 神奈川大学理学研究科修士論文.
- 2) 村田健郎, 名取 亮, 唐木幸比古 (1990) 大型数値シミュレーション. 岩波書店, 東京.
- 3) Hansch W and Selberherr S (1987) MININOS3: balance. *IEEE Trans. Electron Devices* ED-34:1074-1078.

- 4) 村田健郎(1999) CV 法と、手作り数値シミュレーションシステムの奨め(第4回)-連立非線形移流拡散系: 半導体デバイス解析の場合. 計算工学 4:27-34.
- 5) 富澤一隆(1996) 半導体デバイスシミュレーション. コロナ社, 東京.
- 6) 庄野克房(1979) MOS トランジスタと集積回路の基礎. オーム社, 東京.
- 7) ストリートマン; 菊池誠監訳, 大串秀世, 黒須楯生, 松本和彦(1991) 接合型半導体. 東海大学出版会, 東京.

付録 1

セルペクレ数が 2 を超える場合の例

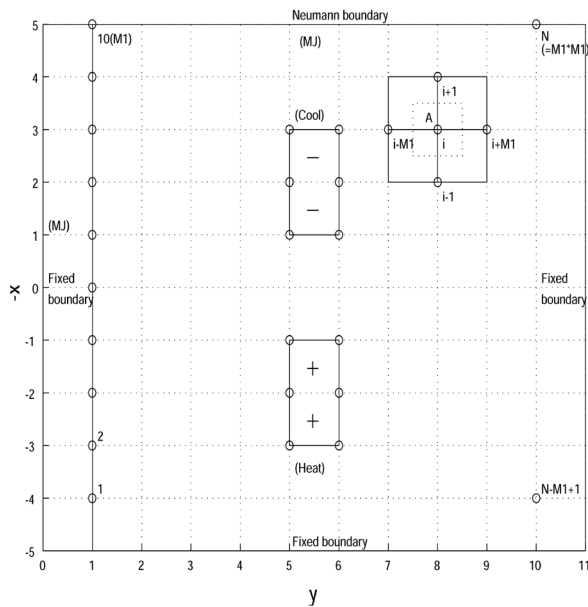


Fig.A.1. Simulation field in thermal sample.

例えば、Fig.A.1 のような、横 (x)11(cm)、縦 (y)10(cm) の板で、上の一辺がノイマン境界 (flux が 0)、他方の左、右、下の三辺が温度 $u = 0.0(^\circ\text{C})$ の固定境界を持つ場を考える。この場に、熱源として中央下側に+の熱源： $+0.2(\frac{\text{cal}}{\text{sec}})$ 、相対して中央上側に-の熱源： $-0.2(\frac{\text{cal}}{\text{sec}})$ を与えた場合 (Fig.A.1 の中央上の 2 マス、中央下の 2 マス) の、熱の移流項をもつ移流拡散方程式 (0.2 等)：

$$\text{div}[-\kappa \nabla u + \mu \mathbf{b}u] = f$$

に従う温度分布 u の定常解を、中心差分と指数差分を用いてシミュレーションした比較結果を Fig.A.2 に示す。左が中心差分による結果で、右が指数差分による結果を示し、温度分布 $u(x, y)$ を等高線表示してある。このとき、式 (0.2 等) において、

$\mathbf{b}=(b_x, b_y)=(0,1)$ すなわち y 方向だけで $b_y = 1$ と一定とし、さらに、伝導度 $\kappa(x, y)$ も移動度 $\mu(x, y)$ も一定値で、しかも、

$$\frac{\mu}{\kappa} = C_0 \quad (= \nu : \text{電流連続方程式において})$$

で与えられるその比 C_0 も一定値とする。1(cm) 当たりの分割数 MJ で与える離散化あみ目の精しさ

MJ も、 x, y 方向共通とし、均等あみ目：

$$h_{x+} = h_{x-} = h_x = h_{y+} = h_{y-} = h_y = \frac{1}{\text{MJ}}$$

として場を設定する。

いわば、一番単純な、係数 κ, μ, b などが場に依らず、均等あみ目で解くという一番解き易い設定とする。この時、全体の離散化あみ目による元数 n は、

$$n = \text{M}2(x \text{ 方向}) \times m(y \text{ 方向}),$$

$$m = \text{M}J \times 10, \text{M}2 = \text{M}J \times 11 - 1: (m = \text{M}1)$$

の節点数となる。MJ=1 ならば、 $n = 10 \times 10 = 100$ 、MJ=5 ならば、 $n = 54 \times 50 = 2700$ となる。セルペクレ数は、 $\mathbf{b}=(b_x, b_y)=(0,1)$ なので、 y 方向だけ考えればよく、次式となる。

$$(A.1.1) \quad \left| \frac{\mu b_y h_y}{\kappa} \right| = \frac{C_0}{\text{MJ}} \leq 2 : \text{セルペクレ数}$$

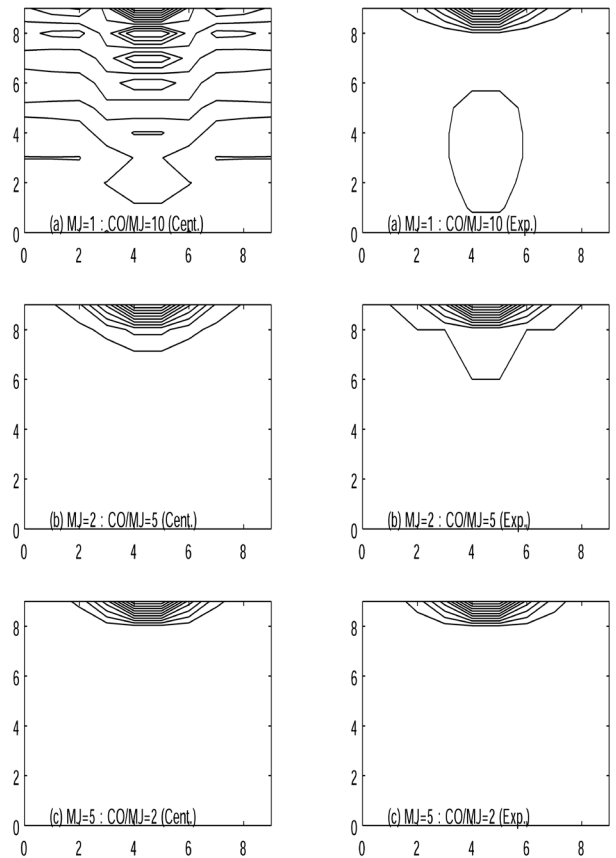


Fig.A.2. u Distribution by Cent and Exp method for $\frac{C_0}{\text{MJ}} = 10, 5, 2$ (MJ=1,2,5; $C_0=10$).

今、 $C_0 = 10$ と固定し、あみ目の分割数 MJ を、上図から、中図、下図へ、1,2,5 と変えてシミュレーションした結果 (左図：中心差分、右図：指数差分) が Fig.A.2 である。このとき、セルペクレ数は、MJ=1, 2, 5 に対して、 $\frac{C_0}{\text{MJ}} = 10, 5, 2$ と変化する。したがって、左図の中心差分で解いた反復法の結果は、MJ=1, 2(上図、中図) では、セルペクレ数が「2」を大きく超えるので、解の収束が不安定で

振動してしまい結果が大きく違ってくる。右図の指数法で解いた結果は、ガウスの直接法で解いた結果(正解)と正確に一致して、正常に解は求まる。

Table A.1. u_{min}, u_{max} convergence for $\frac{C_0(=10)}{MJ}$

MJ	Mesh	$u_{min}(^{\circ}C)$	$u_{max}(^{\circ}C)$	$\frac{C_0}{MJ}$
1	Cent	-0.710	0.418	10
1	Exp	-0.323	0.051	10
2	Cent	-1.181	0.472	5
2	Exp	-0.4565	0.043	5
5	Cent	-0.815(30%)	0.035(0.9%)	2
5	Exp	-0.624(1.0)	0.035(1.0)	2
10	Cent	-0.726(8%)	0.032(0%)	1
10	Exp	-0.672(1.0)	0.032(1.0)	1
20	Cent	-0.680(2%)	0.031(0.9%)	0.5
20	Exp	-0.667(1.0)	0.031(1.0)	0.5

Fig.A.2のシミュレーション結果において、中心差分、指数差分それぞれにおいて、温度の最大値： u_{max} 、最小値： u_{min} を代表点として数値比較すると、Table A.1になる。Table A.1は、Fig.A.2で見ると、セルペクレ数： $\frac{C_0}{MJ}$ が「10」(MJ=1)から「2」に近づくMJ=5になって初めて、中心差分、指数差分の数値結果が近づいてくることを示す。MJ=5で、両差分の違いは u_{min} で30%、 u_{max} で0.9%、参考としてMJ=20(セルペクレ数「0.5」)で、両差分の違いは u_{min} で2%、 u_{max} で0%となる。MJが増え、あみ目が精しくなれば、解の値は下がり、一定値に収束する。どの精度まで必要かが問題となる。Fig.A.3には、各差分法における、MJを精しくしていった場合の推移を示す。Fig.A.3は、横軸がセルペクレ数 $\frac{C_0}{MJ}$ になっており、MJが精しくなるとセルペクレ数は0(左側)に近づく。実線は指数差分、一点鎖線は中心差分の結果を示す。いずれにしても、セルペクレ数が2を超えた場合には、中心差分は使えない。

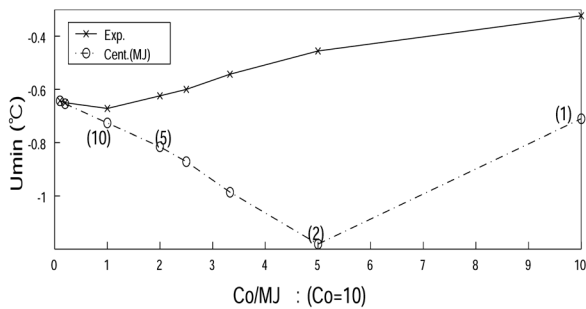
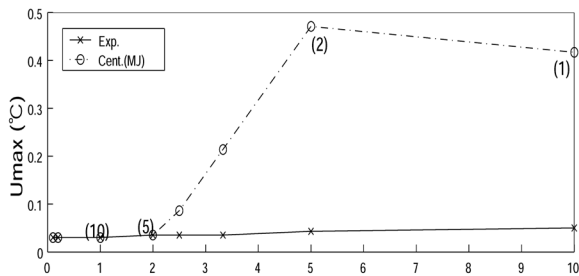


Fig.A.3. u_{min}, u_{max} convergence for $\frac{C_0(=10)}{MJ}$.