

電子のエネルギーバランスを考えた n-MOS デバイスシミュレーション

青木 孝

神奈川大学 理学部 情報科学科

n-MOS Device Simulation included Electron Energy Balances

Takashi Aoki

Department of Information Science, Kanagawa University

Abstract. We developed $(HS)_\beta$ model: enhanced Drift Diffusion model (poisson eq., electron:n, hole:p carrier continuity eq., and electron:n temperature: T_n calculated model). Further more, in this paper, we developed $(HSE)_\beta$ model: n carrier energy balanced model. $(HSE)_\beta$ model was made by adding n carrier energy balance (depending Boltzmann transport eq.) and $(HS)_\beta$ model. We studied and confirmed that this $(HSE)_\beta$ model can express Hot electron effect (g_m/Z_w increasing, velocity overshoot, simulated T_n distribution). Cpu time of $(HSE)_\beta$ by simulation increase 3 multiple more than $(HS)_\beta$ model.

1 はじめに

ポアソン方程式と、電子 n 、正孔 p の電流連続方程式を解く、拡張された移流拡散モデル $(HS)_\beta$ に、電子エネルギーのバランス方程式を 1 本加え、電子温度 T_n を $(HS)_\beta$ の計算モデルではなく、エネルギーバランスにしたがって正しく求める $(HSE)_\beta$ モデルを作った。このエネルギーバランスモデル (厳密には、エネルギー輸送モデル) は、ホットエレクトロン効果をシミュレーションするには必要だと言われているが、実際に、

- [1] ゲート幅 Z_w 当たりの相互コンダクタンス: g_m/Z_w が定性的に増加する。 $(HSE)_\beta$ モデルは $(HS)_\beta$ モデルに比べ 1.2 倍程度増加する。
- [2] 電子のドリフト飽和速度 v_{sat} を超える、速度オーバーシュート現象。
- [3] エネルギーバランスにしたがった電子温度 T_{nmax} の分布と、ホットエレクトロン量を電流 ([A]) として見積もった HCG 評価値の減少とその関係。

等、それが再現できることをシミュレーションにより確認した。なお、 $(HSE)_\beta$ モデルは、電子だけのエネルギーバランス方程式が 1 本増えるので、全体のシミュレーションの収束スキームであるガンメル反復の回数が約 3 倍強 増え、CPU 時間も約 3 倍長くなる。すなわち、

- [4] 電子エネルギーのバランス方程式が 1 本増えることによって解きづらくなり、収束回数も 3 倍強 増える。

ことを明らかにした。このガンメル反復の回数を短くするには、初期値の良さが重要であり、最終あみ目の半分の粗いあみ目で求めた結果を 2 倍に内挿して、それを最終あみ目の

シミュレーションの初期値として使う 2 段階あみ目方式は、この時、有効であることが分かっている。

古典的または半古典的な輸送問題は、ボルツマン輸送方程式によって解けることが知られている。2次元のフルスペックの n-MOS デバイスシミュレーションでは、このボルツマン輸送方程式から導く 8 本のバランス方程式と、1 本のポアソン方程式の連立系として解く。8 本の、各キャリアの濃度、運動量、エネルギーについてのバランス方程式は次のように求める。

ボルツマン方程式の両辺を運動量空間について積分して導いた、

- [1] キャリア濃度 (電子密度 n 、正孔密度 p) のバランス方程式 < 2 > 本
これは、電流連続の方程式と呼ばれる。

また、このボルツマン輸送方程式の両辺に各キャリアの運動量を掛け、運動量空間について積分して導いた、

- [2] 各キャリアの運動量 p (2次元では p_x, p_y) のバランス方程式 < 4 > 本
これは、モビリティ μ に関係しており、各キャリアのドリフト速度 v_d を解く。通常、電気伝導の電子論においては、 $v_d = \frac{J_n}{en} = \mu E$, $\mu = \frac{e}{m} \tau_n$ と定式化する。 J_n は電子電流、 e は電荷、 n は電子密度、 E は電場、 m は電子質量、 τ_n は緩和時間。

また、このボルツマン輸送方程式の両辺に各キャリアのエネルギーを掛け、運動量空間について積分して導いた、

- [3] 各キャリアのエネルギー (ω_n, ω_p) のバランス方程式 < 2 > 本
これは、電子 n と正孔 p のキャリア温度 T_n, T_p を解く。 $\omega_n = \frac{3}{2}kT_n$, $\omega_p = \frac{3}{2}kT_p$ 、 k はボルツマン定数。

一方、電位 ψ のポアソン方程式 1 本は、次のようになる。

$$(1.1) \quad \text{div}[-\varepsilon \nabla \psi] = e(p - n + C), \quad C = -N_a + N_d$$

ここに、 n は電子密度、 p は正孔密度、 e は電荷定数、 C はドーピング量で場所の既知関数、 N_a はアクセプタ濃度、 N_d はドナー濃度、 ε は誘電率で場所の関数。

しかし、このようにフルスペックの合計 9 本の方程式の連立系としてデバイスシミュレーションを行なう場合には、計算機の CPU 時間、メモリの制約から、実務上は解くことが困難であったため従来は、ドリフト拡散モデルという簡便なモデルが使われてきた。近年、計算機の性能が格段に上がり、より精密なモデルを解くことが可能になってきた。ボルツマンの輸送方程式に基づいて、フルスペック 9 本の方程式の連立系として解くモデルをバランス方程式モデルと呼ぶ。このうち、運動量のバランス方程式だけを省略して、モビリティ μ_n, μ_p は計算モデルに置き換えて解くモデルを、エネルギー輸送 (バランス) モデルと呼ぶ。さらに、エネルギーバランス方程式も省略して、電子温度 T_n 、正孔温度 T_p は、計算モデルに置き換えて解くモデルを、拡張されたドリフト拡散方程式モデルと呼び、本論文で使う従来からの $(HS)_\beta$ と呼ぶモデルは、このモデルに相当する。本論文で新たに開発した $(HSE)_\beta$ と呼ぶモデルは、n-MOS を扱うので、従来 $(HS)_\beta$ モデルに電子のエネルギー

バランス方程式 1 本のみを加え、合計 4 本の方程式の連立系としてモデル化したものである。したがって、この $(HSE)_\beta$ モデルは、電子のエネルギーバランスを取り込んだ、エネルギー輸送 (バランス) モデルに相当する。さらに一昔前の、キャリア温度 (T_n, T_p) がモデルに入らないものは、単純化を極めたドリフト拡散モデルと呼ばれ、MOS トランジスタの動作をシミュレーションするための標準的なモデルとなっており、電位 ψ , 電子密度 n , 正孔密度 p についての連立系である (ただし定常解用)。以上により、各モデルを整理すると、Table 1.1 になる。

Table 1.1 Device Simulation Model list

Solve	Eqs.	Drift-Diffusion (DD)	Enhanced DD	Energy Transport (Energy Balance)	Balance Eqs.
model			$(HS)_\beta$	$(HSE)_\beta$	
ψ	1	Poisson	Poisson	Poisson	Poisson
n, p	2	Balance	Balance	Balance	Balance
T_n	1	×	Calcu.	Balance	Balance
T_p	1	×	Calcu.	Calcu.	Balance(Calcu.)
$\mu_n (\mathbf{v}_{dn})$	2	Calcu.	Calcu.	Calcu.	Balance
$\mu_p (\mathbf{v}_{dp})$	2	Calcu.	Calcu.	Calcu.	Balance(Calcu.)

ドリフト拡散モデルでは、ボルツマン輸送方程式に基づく前述 [1] の各キャリア濃度のバランス方程式 (1.2)(1.3) 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) と、ポアソン方程式 (1.1) 1 本の合計 3 本を連立させて解く。

$$(1.2) \quad \text{div}[-D_n \nabla n + (\mu_n \nabla \psi)n] = GR, \quad \mathbf{J}_n = -e[-D_n \nabla n + (\mu_n \nabla \psi)n]$$

$$(1.3) \quad \text{div}[-D_p \nabla p - (\mu_p \nabla \psi)p] = GR, \quad \mathbf{J}_p = +e[-D_p \nabla p - (\mu_p \nabla \psi)p]$$

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るが様々なモデルが提案されている。拡散係数 $D_{n,p}$ とは、Einstein の関係: $\mu/D = e/k_B T = \nu$ (Einstein 定数) で結びつく。従来は、 $T = T_l$ (格子温度) としたが、ホットキャリア用の $(HS)_\beta$ モデルでは、この Einstein 定数 ν がキャリア温度 (電子 T_n , 正孔 T_p) の関数だとして、局所的な場で Einstein の関係 :

$$(1.4) \quad \nu_{n,p} = \frac{e}{k_B T_{n,p}} \quad [V^{-1}]$$

が成り立つとする。電子温度 T_n , 正孔温度 T_p は、計算モデルで与える。右辺の GR 項はキャリア生成結合項で、通常 次の 3 項: キャリアの緩和時間を含む熱的なキャリア生成消滅項 $(GR)_{SRH}$ と、キャリア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オージェ項 $(GR)_{Aug}$ と、インパクトイオン化によるキャリア生成項 (Ga) でモデル化する。

シミュレーションでホットエレクトロン効果を見るには、電子のエネルギーバランス方程式を入れる必要があると言われている。本報告では、我々の従来の拡張されたドリフト拡散モデル $(HS)_\beta$ に、電子のエネルギーバランス方程式を組み入れることにより新たな $(HSE)_\beta$

モデルが、ホットエレクトロン効果をどのように表現できるのかを、従来の $(HS)_\beta$ モデルとのシミュレーション結果の比較により確認した。土台となる $(HS)_\beta$ モデルは、Hansch と Selberherr が、ホットキャリア現象を扱うために、キャリア n, p のエネルギーバランスを簡易的に組み込んだ、キャリア温度 T_n, T_p をモビリティ μ_n, μ_p から計算 ($\mu_{n,p} = \mu(T_{n,p})$) 式を作り、逆にそれ解いた計算式となっている) する拡張ドリフト拡散モデルに、Lee にならってモビリティ $\mu_{n,p}$ が SiO_2 界面においてユニバーサリティを持つように改良を加えた村田のモデルである。モビリティ $\mu_{n,p}$ は、Hansch と Selberherr にならって、電子、正孔のドリフト飽和速度 v_{nsat}, v_{psat} で、ドライビングフォースによるドリフト速度が律速になるように定式化し、 $(HS)_\beta$ 、 $(HSE)_\beta$ と同じモデル式を使う。

2 従来の $(HS)_\beta$ と新 $(HSE)_\beta$ モデル

従来の $(HS)_\beta$ モデルと新 $(HSE)_\beta$ モデルの共通部分および、違いを示す。 GR 項と、モビリティ $\mu_{n,p}$ の計算モデルは両モデルで共通である。

2.1 キャリア生成結合項 (GR 項) のモデル

GR 項は、物理的な側面から次の 3 項から構成してある。

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

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

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

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

$(GR)_{SRH} > 0$ 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 は、ド - ピングに依存する電子、正孔のライフタイムである。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 - ジェ過程)。

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

$$C_n = 2.8 \times 10^{-31}, \quad C_p = 9.9 \times 10^{-32} \quad [\text{cm}^6][\text{sec}^{-1}]$$

[3] Ga : オ - 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。

$$Ga = \frac{|J_n|}{e} \alpha_n + \frac{|J_p|}{e} \alpha_p \quad [\text{cm}^{-3}][\text{sec}^{-1}]$$

$$\begin{aligned}\alpha_n &= A_n \cdot e^{\frac{-B_n}{|E_x|}}, & \alpha_p &= A_p \cdot e^{\frac{-B_p}{|E_x|}} \quad [\text{cm}^{-1}] \\ A_n &= 7.0 \times 10^5, & A_p &= 1.588 \times 10^6 \quad [\text{cm}^{-1}] \\ B_n &= 1.23 \times 10^6, & B_p &= 2.036 \times 10^6 \quad [\text{V}][\text{cm}^{-1}]\end{aligned}$$

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 SiO_2 界面に水平な方向 (x 方向) の成分: $|E_x|$ を使うと良い。我々は、この $|E_x|$ を使うことによって、基盤電流 I_{sub} とゲート電圧 V_G との特性 ($I_{sub} - V_G$ 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。

2.2 モビリティ $\mu_{n,p}$ の計算モデル ((HS) $_{\beta}$ と (HSE) $_{\beta}$ に共通)

電子と正孔の電流連続の方程式 (1.2)(1.3) に現れる $\mu_{n,p}$ は、電子、正孔のモビリティで、場所と電位の関数であるが様々なモデルが提案されている。拡散係数 $D_{n,p}$ とは、Einstein の関係: $\mu/D = e/k_B T = \nu$ (Einstein 定数: $T = 300[\text{K}]$ の時、 $\nu \equiv \nu_0 = 38.68$) で結びつく。従来は、 $T = T_l$ (格子温度) としたが、ホットキャリア用に拡張されたドリフト拡散モデルの1つ、Hansch と Selberherr の (HS) モデルでは、この Einstein 定数 ν がキャリア温度 (電子 T_n , 正孔 T_p) の関数だとして、局所的な場で Einstein の関係 :

$$(2.1) \quad \nu_{n,p} = \frac{e}{k_B T_{n,p}} = \frac{\mu_{n,p}}{D_{n,p}} = \left(\frac{1}{U t_{n,p}} \text{とする} \right) \quad [\text{V}^{-1}] \quad \text{式 (1.4) と同じ}$$

$$T_{n,p} = \frac{e}{k_B} U t_{n,p} = \frac{11610.145}{\nu_{n,p}} \quad [\text{K}], \quad D_{n,p} = \mu_{n,p} U t_{n,p}$$

が成り立つとして解く。さらに (HS) モデルでは、(HSE) $_{\beta}$ モデルのようにエネルギーバランス方程式を数値的には解かずに、キャリア温度 T_n, T_p をモビリティの関数として計算式で与えてしまうことで、ホットキャリア効果を簡易的に組み込んでいる。

この式 (2.1) は、電子のエネルギー ω_n が主に熱エネルギーだとすれば、

$$(2.2) \quad \omega_n = \frac{3}{2} k_B T_n = \frac{3}{2} e U t_n \quad [\text{V}]$$

となり、言わば前述 [3] の電子のエネルギーバランス方程式に代わるものを簡便な形でシミュレーションに取り入れることにつながる。Hansch と selberherr は、本来は前述 [2] の運動量 (あるいはドリフト速度 v_d) のバランス方程式を解いて得るべきモビリティ $\mu_n (= \frac{|v_d|}{|E|})$ を、モビリティの電場 E 依存性に、ドライビングフォース $|F_n|$ ($J_n = -en\mu_n F_n$ の関係) を導入して、モビリティ μ_n とキャリア電子温度 T_n を関係づけ、 $\mu_n = \mu_n^{LISF}(F(U t_n))$ として計算式をモデル化し、一方、キャリア電子温度 $T_n (= \frac{e}{k_B} U t_n)$ は、エネルギーバランス方程式を解かないで、モビリティ μ_n の表面散乱効果と電場依存性の関係から逆算して計算式をモデル化することを提案した。キャリアの正孔についても同様な仕方で μ_p, T_p をモデル

化する。この (HS) モデルにより、モビリティ $\mu_{n,p}$ 、キャリア温度 $T_{n,p}$ は、バランス方程式を解かずに簡便化でき、ドリフト 拡散方程式の中に拡張化され組み込める。

我々(村田ら)は、Selberherrらのこの (HS) モデルに、さらにパラメータ β , γ_T , γ_F を加えたモデルを、(HS) $_{\beta}$ 従来モデルとして作成した。不純物濃度依存性と、表面散乱効果にパラメータ β を導入してユニバーサリティを考慮した各キャリアのモビリティを、 μ_n^{LIS} , μ_p^{LIS} と表わし、その上に電場依存性を考慮したモビリティ $\mu_{n,p}^{LISF}$ を $Ut_{n,p}(= \frac{k_B}{e} T_{n,p} [V])$ の関数として、次のように $\mu_{n,p} = \mu_{n,p}^{LISF}(F_{n,p}(Ut_{n,p}))$ として計算モデル化する。

[1] 電場依存性

$$(2.3) \quad \mu_n^{LISF} = \frac{2\mu_n^{LIS}}{1 + \sqrt{1 + (2\mu_n^{LIS} \cdot |\mathbf{F}_n| / v_n^{sat})^2}} \left[\frac{\text{cm}^2}{\text{V} \cdot \text{s}} \right] \quad v_n^{sat} = 0.90 \cdot 10^7 \text{ [cm/s]}$$

$$(2.4) \quad \mu_p^{LISF} = \frac{\mu_p^{LIS}}{1 + (\mu_p^{LIS} \cdot |\mathbf{F}_p| / v_p^{sat})} \left[\frac{\text{cm}^2}{\text{V} \cdot \text{s}} \right] \quad v_p^{sat} = 0.7982 \cdot 10^7 \text{ [cm/s]}$$

$$(2.5) \quad |\mathbf{F}_n| = \left| \nabla\psi - \frac{\gamma_F}{n} \nabla(n \cdot Ut_n) \right|, \quad |\mathbf{F}_p| = \left| \nabla\psi + \frac{\gamma_F}{p} \nabla(p \cdot Ut_p) \right|$$

$$\mathbf{J}_n = -en\mu_n\mathbf{F}_n, \quad \mathbf{J}_p = -ep\mu_p\mathbf{F}_p, \quad Ut_n = \frac{1}{\nu_n} = \frac{k_B}{e} T_n [V], \quad Ut_p = \frac{1}{\nu_p} = \frac{k_B}{e} T_p [V]$$

パラメータ γ_F は、 $\gamma_F = 0.0$ ならば、 $\mathbf{F}_n = \mathbf{E}$ となり、ドライビングフォース \mathbf{F}_n と電場 \mathbf{E} とをつなぐ役割をする。 \mathbf{F}_n は、電場 \mathbf{E} の電流方向成分: $\frac{|\mathbf{E} \cdot \mathbf{J}_n|}{|\mathbf{J}_n|}$ と似た性質をもつので、パラメータ γ_F は電流値のチューニングに利用する。今報告では、 $\gamma_F = 0.38$ とする。式 (2.5) を見て分かるように、パラメータ γ_F は、電場 $\nabla\psi$ に、 $Ut_n(T_n)$ の効果を入れる度合いを示す。 $\mu_{n,p}^{LIS}$ モデルは、Selberherrらによる $\mu_{n,p}^{LIS}$ モデルを手直しして、表面散乱効果に Lee にならって、山口モデルにユニバーサリティをもつように改良したものを使う。この我々の改良に伴って加えたパラメータ β は、 $\beta = 0.5$ とした。

[2] 表面散乱効果

$$(2.6) \quad \mu_{n,p}^{LIS} = \frac{\mu_{n,p}^0 + (\mu_{n,p}^{LI} - \mu_{n,p}^0)[1 - F(y)]}{\sqrt{1 + F(y) \cdot \beta \frac{|E_y|}{E_{n,p}^C}}}, \quad \beta = 0.5 \text{ とする}$$

$$\mu_n^0 = 850[\text{cm}^2/\text{Vs}], \quad \mu_p^0 = 270[\text{cm}^2/\text{Vs}], \quad E_n^C = 6.49 \cdot 10^4[\text{V/cm}], \quad E_p^C = 1.87 \cdot 10^4[\text{V/cm}]$$

$$F(y) = \frac{2 \cdot \exp(-(\frac{y}{y_{ref}})^2)}{1 + \exp(-2(\frac{y}{y_{ref}})^2)}, \quad y_{ref} = 10^{-6}[\text{cm}]$$

y は、 SiO_2 界面上からバックゲート方向への距離で、例えば、

$$F(0.1\mu\text{m}/80) \cong 0.9999, \quad F(0.1\mu\text{m}/8) \cong 0.4, \quad F(0.1\mu\text{m}/4) \cong 0.004$$

となり、表面近傍だけが効くようにする。したがって SiO_2 界面 $y = 0$ では、

$$\mu_n^{LIS} = \frac{850}{\sqrt{1 + \frac{|E_y|}{1.298 \cdot 10^5}}}$$

となり、 μ^{LIS} モデルは、強反転領域で不純物に依存しないというユニバーサリティを満足する。不純物濃度による依存性は、 μ^{LI} に入る。

[3] 不純物濃度依存性

$$(2.7) \mu_{n,p}^{LI} = \mu_{n,p}^{min} + \frac{\mu_{n,p}^L - \mu_{n,p}^{min}}{1 + \left(\frac{C_I}{C_{n,p}^{ref}}\right)^{0.72}}, \quad C_I = N_a + N_d (\text{アクセプタ, ドナーのドーピング量})$$

$$\text{ここで, } \mu_n^L = 1430[\text{cm}^2/\text{Vs}], \quad \mu_p^L = 460[\text{cm}^2/\text{Vs}]$$

$$\mu_n^{min} = 80[\text{cm}^2/\text{Vs}], \quad \mu_p^{min} = 45[\text{cm}^2/\text{Vs}], \quad C_n^{ref} = 1.12 \cdot 10^{17}[\text{cm}^{-3}], \quad C_p^{ref} = 2.23 \cdot 10^{17}[\text{cm}^{-3}]$$

2.3 キャリア温度 T_n, T_p の計算モデル ((HS) $_{\beta}$ だけ)

(HS) $_{\beta}$ モデルでは、(HS) モデルの方法にパラメータ γ_T (あるいは γ'_T) を導入して手直しして、キャリア温度 $Ut_{n,p}$ [V] ($T_{n,p}$ [K]) を次式のようにモデル化する。

$$(2.8) \quad Ut_{n,p} = U_{T_0} \left[1 + \gamma'_T \left(\frac{\mu_{n,p}^{LIS}}{\mu_{n,p}^{LISF}} - 1 \right) \right] = \frac{1}{\nu_{n,p}} = \frac{k_B}{e} T_{n,p}$$

$$U_{T_0} \equiv \frac{k_B T_l}{e} = \frac{k_B (300\text{K})}{e} = \frac{1}{38.68} = \frac{1}{\nu_0}$$

$$(2.9) \quad \gamma'_T = \gamma_T \cdot \left(\frac{V_G^8}{1 + V_G^8} \right)$$

とモデル化する。式 (2.8) は、モビリティ $\mu_{n,p}$ をキャリア温度 $T_{n,p}$ でモデル化した式を逆に解いた形になっている。 γ'_T はパラメータで、Einstein 定数 $\nu_{n,p}$ に関係する。 $\gamma'_T = 0$ ($\gamma_T = 0$) の時には、 $Ut_{n,p} = U_{T_0}$ となり、 $T_{n,p}$ は格子温度 $T_{n,p} = 300[\text{K}]$ となり、キャリア温度を考えない、単純化極まるドリフト拡散モデルに等しくなる。元もと (HS) モデルの γ'_T は、範囲 $[0,1]$ の緩和パラメータで、 $\gamma'_T = \gamma_T$ (固定値) そのものであったが、それでは V_G を $0[\text{V}]$ に近づけた時に基板電流 I_{sub} が $0[\text{mA}]$ に向かい最後まで落ちて行かず、途中から増え出すという事が起こった。そのため、我々の (HS) $_{\beta}$ モデルでは、この γ'_T 値を固定値 γ_T とせず、ゲート電圧 V_G に依存して、 γ'_T 値が γ_T (漸近値) から、 $V_G=0[\text{V}]$ における $\gamma'_T = 0$ に連続的に移行するように：式 (2.9) を導入して変え、 $V_G = 0[\text{V}]$ の時に I_{sub} が $0[\text{mA}]$ に落ちるようにし向けた。 γ'_T は、 $V_G=3[\text{V}]$ の時 $0.9998\gamma_T$ 、 $V_G=1[\text{V}]$ の時に $0.5\gamma_T$ となる。シミュレーションでは、離散化の際に、 $T_{n,p}$ と $Ut_{n,p}$ は離散格子点上で計算するキャリア温度を表わし、 $\nu_{n,p}$ は離散化した面で与え計算する値として、厳密に区別し扱い離散方程式を立て、式 (2.8) 等の計算もする。 $\nu_{n,p}$ と $T_{n,p}$ との間の変換は、シミュレーション時に行なう。

パラメータ γ_T のチューニングは、次のように電子温度 T_n をチューニングすることで (するために) 行なう。まず、反転層と接するドレインの N_d ドーピング端で、ラッキーエレクトロンの電子温度 T_n と x 方向電場 E_x は、

$$(2.10) \quad k_B T_n = e E_x \cdot l$$

との関係で結びつけられると考える。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 (2.10) から計算した電子温度 T_n^C :

$$(2.11) \quad T_n^C = \frac{eEx \cdot l}{k_B}, \quad Ex \text{ はシミュレーション結果 } (l = 0.0078[\mu\text{m}])$$

が、 γ_T を上げて (T_n も上がる) シミュレーションしたドーピング端の結果 T_n と近づくように ($T_n^C \simeq T_n$)、 γ_T を決めることにする。Fig 2.1 では、シミュレーション結果 T_n と、 $T_n^C (= \frac{eEx \cdot l}{k_B})$ がクロスする点の横軸 γ_T の値がチューニング値となる。

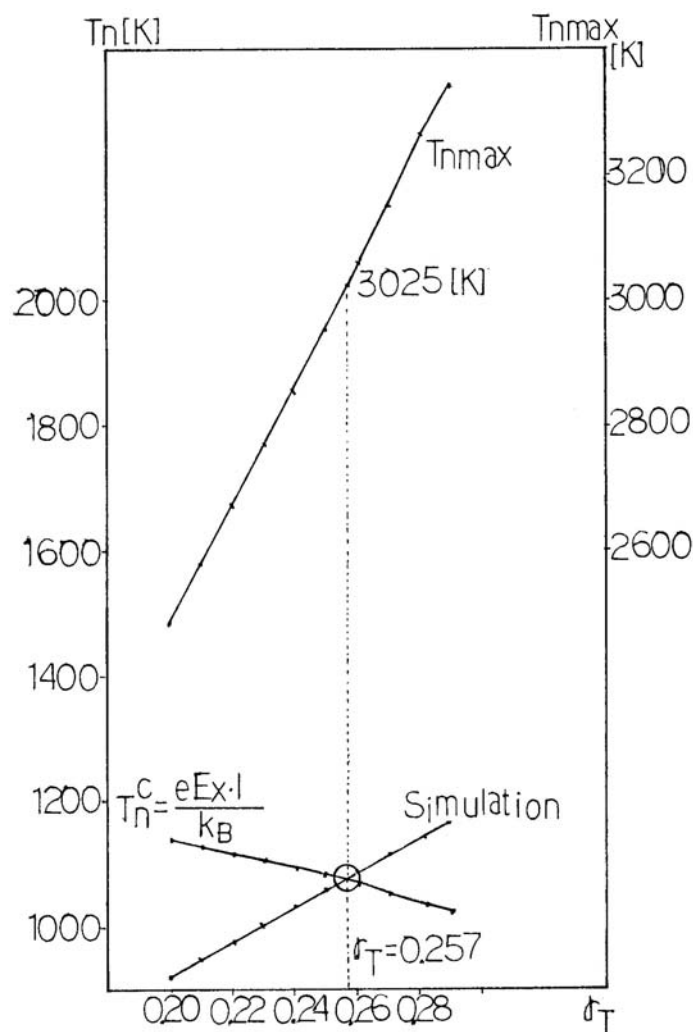


Fig.2.1 Tuning of Parameter γ_T ($\gamma_F=0.38$)

Fig 2.1 のクロスした右上がりの実線が、チューニング点での電子温度 T_n のシミュレーション結果を示し、横軸の γ_T を上げることにより、 T_n も上がる。同様に図の上にある実線のように、最大電子温度 T_{nmax} も γ_T が上がるにつれ上昇する。一方、クロスした右下がりの実線は、チューニング点での Ex のシミュレーション結果から式 (2.11) により計算した T_n^C の推移である。ちょうどクロスした γ_T 値が、適切な値と考える。チューニング点の場合

所は、チャンネルのドレイン端とする。ここでの、 $\gamma_F = 0.38$ としたゲート長 $L_g = 0.2[\mu\text{m}]$ におけるシミュレーションでは、Fig 2.1 より、 $\gamma_T = 0.257$ としてチューニングすることとした。この $\gamma_T = 0.257$ の値は、ゲート長 $L_g = 0.1[\mu\text{m}]$ でも同じ値を使う。

以上、村田らが Selberherrらの拡張モデルを改良したドリフト拡散モデル $(\text{HS})_\beta$ の、キャリア温度 $T_{n,p}$ の計算モデルを示した。エネルギーバランス方程式を数値的に解かずに、 $T_{n,p}$ を計算式 (2.8) で与えることにより簡易化する。

2.4 ガンメル反復とシミュレーション

$(\text{HS})_\beta$ モデルより厳密に解く、バランス方程式によるデバイスシミュレーションモデルでは、式 (2.8) のキャリア温度 $U_{t_{n,p}}$ の簡易計算モデルの代わりに、エネルギーのバランス方程式を数値的に厳密に解くことで、 $U_{t_{n,p}}(T_{n,p}$ と同じ) を求めることになる。本報告では、n-MOS を扱うので、電子温度 U_{t_n} だけをエネルギーバランス方程式から求め、正孔温度 U_{t_p} については、式 (2.8) の計算式をそのまま使う $(\text{HSE})_\beta$ モデルを作り、拡張されたドリフト拡散モデル $(\text{HS})_\beta$ とエネルギーバランスだけを組み込むエネルギー輸送モデル $(\text{HSE})_\beta$ とのシミュレーション結果を比較する。エネルギー輸送モデル $(\text{HSE})_\beta$ では、拡張ドリフト拡散モデル $(\text{HS})_\beta$ より、電子温度 U_{t_n} (T_n) を数値的に厳密に解くエネルギーバランス方程式 1 本を増やして、完全バランス方程式モデルの 9 本の方程式の内、4 本で解くことになる。このへんの各モデルのプログラムレベルでの違いを、Table 2.1 にサブルーチンと計算単位で示した。Table 1.1 とは、整理の仕方が違うだけで内容は同じである。

Table 2.1 Comparison of $(\text{HS})_\beta$ and $(\text{HSE})_\beta$ for Subroutine

Routine	Name : Solve	Solve	Enhanced Drift-Diffusion	Energy Transport (Energy Balance)	Balance Eqs.
model			$(\text{HS})_\beta$	$(\text{HSE})_\beta$	
poisson	POISON	ψ	Solve	Solve	Solve
n Balance	NINPUT	n	$:\text{div} \frac{\mathbf{J}_n}{-e} = GR$	$:\text{div} \frac{\mathbf{J}_n}{-e} = GR$	Solve
p Balance	PINPUT	p	$:\text{div} \frac{\mathbf{J}_p}{e} = GR$	$:\text{div} \frac{\mathbf{J}_p}{e} = GR$	Solve
v_{dn} Balance		μ_n	$\mu_n(F_n(U_{t_n}))\text{Calcu.}$	$\mu_n(F_n(U_{t_n}))\text{Calcu.}$	Solve
v_{dp} Balance		μ_p	$\mu_p(F_p(U_{t_p}))\text{Calcu.}$	$\mu_p(F_p(U_{t_p}))\text{Calcu.}$	(Solve)
U_{t_n} Balance	UTNINP	U_{t_n}	$T_n(=\frac{e}{k_B}U_{t_n})\text{Calcu.}$	Solve	Solve
U_{t_p} Balance		U_{t_p}	$T_p(=\frac{e}{k_B}U_{t_p})\text{Calcu.}$	$T_p(=\frac{e}{k_B}U_{t_p})\text{Calcu.}$	(Solve)

$(\text{HS})_\beta$ モデルでも、 $(\text{HSE})_\beta$ モデルでも、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バランス方程式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、次の Fig2.2 のような反復に従う。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 $\psi^{(0)}, n^{(0)}, p^{(0)}, \nu_n^{(0)}, \nu_p^{(0)}$ と $\nu_{nm}^{(0)}$ を用意, (HSE) $_{\beta}$ では $U_{tn}^{(0)}$ を用意. $k = 0$
(この初期値が収束の良し悪しを決める.)

$$\nu_{nm}^{(0)} \leftarrow \nu_n^{(0)}$$

do while ($\| \text{div}(-\varepsilon \nabla \psi^{(k)}) - e(p^{(k)} - n^{(k)} + C) \| \geq EPSNO * \| e(p^{(k)} - n^{(k)} + C) \|$) {
(ここで $EPSNO = 1.6 \cdot 10^{-5}$ とする.)

solve ψ^{k+1} : (ガンメルの線形化をし MICCG(1,3) 使用) POISON を解く.

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

ドライビングフォース: $F_{n,p}^{(k+1)}(\nu_{n,p}^{(k)}, \psi^{(k+1)})$ を更新

$\mu_{n,p}^{(k+1)}(F_{n,p}^{(k+1)})$ を更新

(HS) $_{\beta}$ では $\nu_n^{(k+1)}(\mu_n^{(k+1)})$ を更新

$\nu_p^{(k+1)}(\mu_p^{(k+1)})$ を計算

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

(HSE) $_{\beta}$ では $\nu_n^{(k+1)} \leftarrow \nu_{nm}^{(k)}(UTNINP \text{ の解 } U_{tn}^{(k)} \text{ から作ったもの})$

solve $n^{(k+1)}(\nu_n^{(k+1)})$: (Bi-CGSTAB(1,3) 使用) 電流連続 NINPUT を解く.

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

solve $p^{(k+1)}(\nu_p^{(k+1)})$: (Bi-CGSTAB(1,3) 使用) 電流連続 PINPUT を解く.

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

solve $U_{tn}^{(k+1)}(U_{tn}^{(k)}, \nu_n^{(k+1)})$: (Bi-CGSTAB(1,3) 使用) (HSE) $_{\beta}$ では電子のエネルギーバランス UTNINP を解く.

$$\begin{aligned} [\text{div}(-\frac{5}{2} n^{(k+1)} \mu_n^{(k+1)} U_{tn}^{(k)} \nabla + \frac{5}{2} J_n^D(k+1))] U_{tn}^{(k+1)} = \\ J_n^D(k+1) (\nabla \psi^{(k+1)}) - \frac{3}{2} n^{(k+1)} \nu_{\omega n} (U_{tn}^{(k)} - U_{T_0}) \quad (\text{両辺に } U_{tn}^{(k)} \text{ を使う}) \end{aligned}$$

$$\text{ここで, } J_n^D(k+1) = -\frac{\mu_n^{(k+1)}}{\nu_n^{(k+1)}} \nabla n^{(k+1)} + \mu_n^{(k+1)} (\nabla \psi^{(k+1)}) n^{(k+1)} \quad (\nu_n^{(k+1)} \text{ を使う})$$

(HSE) $_{\beta}$ では $U_{tn}^{(k+1)} \rightarrow \nu_{nm}^{(k+1)}$: UTNINP の解 $U_{tn}^{(k+1)}$ の格子点上の点温度 $U_{tn}^{(k+1)}$ を平均して面温度 $\nu_{nm}^{(k+1)}$ を作る. TN2MEN で計算

$$\text{ここで, } \nu_{nmP}^{(k+1)} = \frac{4}{U_{tn_i}^{(k+1)} + U_{tn_{i-1}}^{(k+1)} + U_{tn_{i-1-m}}^{(k+1)} + U_{tn_{i-m}}^{(k+1)}}$$

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

$k = k + 1$ } **end do while**

Fig.2.2 Gummel convergence scheme

この Fig2.2 の全体を収束させる反復ループの中で、ポアソン方程式 (1.1)(POISON)、電子の電流連続方程式 (1.2)(NINPUT)、正孔の電流連続方程式 (1.3)(PINPUT) を数値的に解く。更新した電位 ψ を使い、モビリティ $\mu_{n,p}$ を計算した後に、 $(HS)_\beta$ モデルでは面温度 $\nu_{n,p}$ を簡易的な数式 (2.8) により計算してしまう。 $(HSE)_\beta$ モデルでは、さらに電子の電流連続方程式を解いた後に、更新した n 等を使い電子のエネルギーバランス方程式を数値的に解き (UTNINP)、解いた点温度 U_{tn} [V] から、面温度 $\nu_n (= \frac{1}{U_{tn}})$ に TN2MEN で変換した値 ν_{nm} を作り、先の $(HS)_\beta$ モデルで ν_n を計算した処理の所で、この変換した値 ν_{nm} を代入して $\nu_n^{(k+1)}$ を更新する。

実際のプログラムでは、電子温度を解く UTNINP では、離散化方程式の両辺の U_{tn} には $U_{tn}^{(k)}$ を使い、その中の移流項にある電流計算部分 J_n^D には $\nu_n^{(k+1)}$ を使って $U_{tn}^{(k+1)}$ を解く。他の $(HS)_\beta$ と共通の部分では、すべて $\nu_{n,p}$ を使って解く。詳しくはループ中の依存関係から、POISON では更新前の $\nu_{n,p}^{(k)}$ 、NINPUT, PINPUT では更新後の $\nu_{n,p}^{(k+1)}$ を使って解く。すなわち、 $\nu_n^{(k)}$ を使い、 $\psi^{(k+1)}$ を解き (POISON)、 $\psi^{(k+1)}$ 等から $\mu_{n,p}^{(k+1)}$ を計算し、 $\nu_{n,p}^{(k+1)}$ を作る。さらに、更新した $\nu_{n,p}^{(k+1)}$ から、電子密度 $n^{(k+1)}$ を解き (NINPUT)、正孔密度 $p^{(k+1)}$ を解き、 $(HSE)_\beta$ モデルでは、 $U_{tn}^{(k)}$ 、 $\nu_n^{(k+1)}$ 、 $n^{(k+1)}$ 、 $\mu_n^{(k+1)}$ 、 $\psi^{(k+1)}$ から $U_{tn}^{(k+1)}$ を解く (UTNINP)。このループを、 $(k+1)$ 段で得た値を用いて再計算した全体のポアソン方程式の残差が EPSNO 以下になるまで反復する。 $(HS)_\beta$ モデルでは、面温度 $\nu_{n,p}^{(k+1)}$ を式 (2.8) を変形した：

$$(2.12) \quad \nu_{n,p}^{(k+1)} = \nu_0 \left[1 + \gamma'_T \left(\frac{\mu_{n,p}^{LIS(k+1)}}{\mu_{n,p}^{LISF(k+1)}} - 1 \right) \right]^{-1} = \frac{1}{U_{tn,p}}, \quad \nu_0 = \frac{e}{k_B T_l} = \frac{1}{U_{T_0}}$$

によって計算する。温度 $U_{tn,p}$ は点で与え、温度 $\nu_{n,p}$ は面で与え、離散化する時にはその違いを厳格に守る。したがって、UTNINP で解いた $U_{tn}^{(k+1)}$ は、TN2MEN で

$$\text{点 } U_{tn}^{(k+1)} \rightarrow \text{面 } \nu_n^{(k+1)}$$

に 4 点平均を取り換算して、他の $(HS)_\beta$ 、 $(HSE)_\beta$ モデルの共通部分で使う。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 2.2 になる。

Table 2.2 Iteration Dependency of Variables: $(k) \rightarrow (k+1)$ Step

$(k+1)$	Name	(k) Dependency
$\nu_n^{(0)(k+1)}$	$(HSE)_\beta$	$\nu_n^{(0)(k)}$ (or $U_{tn}^{(0)(k)}$)
$\psi^{(k+1)}$	POISON	$\psi^{(k)}$, $n^{(k)}$, $p^{(k)}$, $\nu_n^{(k)}$, $\nu_p^{(k)}$
$F_{n,p}^{(k+1)}$		$\psi^{(k+1)}$, $n^{(k)}$, $p^{(k)}$, $\nu_n^{(k)}$, $\nu_p^{(k)}$
$\mu_{n,p}^{(k+1)}$		$F_{n,p}^{(k+1)}$
$\nu_{n,p}^{(k+1)}$	$(HS)_\beta$	$\mu_{n,p}^{(k+1)}$
$\nu_n^{(k+1)}$	$(HSE)_\beta$	$U_{tn}^{(k)}$, $\nu_n^{(0)(k+1)}$ (TN2MEN)
$\nu_p^{(k+1)}$	$(HSE)_\beta$	$\mu_p^{(k+1)}$
$n^{(k+1)}$	NINPUT	$n^{(k)}$, $\psi^{(k+1)}$, $\nu_n^{(k+1)}$, $\mu_n^{(k+1)}$, $GR^{(k)}$
$p^{(k+1)}$	PINPUT	$p^{(k)}$, $\psi^{(k+1)}$, $\nu_p^{(k+1)}$, $\mu_p^{(k+1)}$, $GR^{(k)}$
$U_{tn}^{(k+1)}$	UTNINP	$U_{tn}^{(k)}$ (or $\nu_n^{(k+1)}$ for IUKM1=0), $n^{(k+1)}$, $\psi^{(k+1)}$, $\mu_n^{(k+1)}$, $J_n^{D(k+1)}(\nu_n^{(k+1)})$
$J_{n,p}^{(k+1)}$		$n^{(k+1)}$, $\psi^{(k+1)}$, $\nu_{n,p}^{(k+1)}$, $\mu_{n,p}^{(k+1)}$, $p^{(k+1)}$
$GR^{(k+1)}$		$n^{(k+1)}$, $\psi^{(k+1)}$, $J_{n,p}^{(k+1)}$, $p^{(k+1)}$

全体のガンメル反復の収束は、EPSNO で行ない、それぞれの方程式: POISON, NIN-PUT, PINPUT, UTNINP の内部反復計算の収束判定値、すなわち準ニュートン反復の判定値は、それぞれ、

EPSN=0.5D-9: POISON ポアソン (拡散) 方程式用 (離散化対称行列を MICCG(1,3) で解く)

EPSNL=0.5D-9: NINPUT 電子の電流連続 (移流拡散) 方程式 (非対称行列を BCGSTAB(1,3) で解く)

EPSNP=1.0D-5: PINPUT 正孔の電流連続 (移流拡散) 方程式 (非対称行列を BCGSTAB(1,3) で解く)

EPSNU=0.5D-5: UTNINP 電子のエネルギーバランス (移流拡散) 方程式 (非対称行列を BCGSTAB(1,3) で解く)

としている。ここで、ソルバの MICCG 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付き共役勾配法」で、BCGSTAB は「スタブ入りの双共役勾配法」を表わす。n-MOS のシミュレーションでは、それぞれの方程式計算内のガンメル反復に相当する準ニュートン反復の回数は、ポアソン方程式でも電流連続、エネルギーバランスの移流拡散方程式でも 1 回で収束する。

さらに、それぞれの方程式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である、ポアソン方程式内の ICCG 反復 ($\psi^{(k)}$ から $\psi^{(k+1)}$ を解く) の収束判定値 (EPSICW)、移流拡散方程式内の BCG 反復の収束判定値は、準ニュートン反復判定値をある乗数: EPSDIV, EPSDIL, EPSDIP, EPSDIU などによって割ることによって作る。それぞれの方程式の内部反復用の収束判定値は、次のように、

EPSN/ EPSDIV: POISON の ICCG 反復の収束判定値 (内部反復用)

EPSNL/ EPSDIL: NINPUT の BCG 反復の収束判定値 (内部反復用)

EPSNP/ EPSDIP: PINPUT の BCG 反復の収束判定値 (内部反復用)

EPSNU/ EPSDIU: UTNINP の BCG 反復の収束判定値 (内部反復用)

となる。したがって、例えばポアソン方程式を解く際の ICCG 反復の (内部) 収束判定値: EPSICW は、

$$\text{EPSICW} = \text{EPSN} / \text{EPSDIV}$$

となる。この作り方は、所望の離散あみ目の解を求める第 2 段のための初期値に、あみ目を半分に粗く収束判定値も粗くして求めた第 1 段の解を利用する「2 段階あみ目法」には有効である。準ニュートン反復の収束判定値は変えず、乗数のみを小さくすることで第 1 段目の収束を粗くする。ガンメル反復の初期値の良し悪しは、ガンメル反復の収束回数に大きく関係し、CPU 時間に大きく影響を及ぼし、悪い初期値では解が解けないことがある。この章の後でふれる、1 段目の粗い解を 2 段目の初期値に使う「2 段階あみ目法」は、n-MOS シミュレーションでも非常に有効であることが、村田によって確認されている。これらのガンメル (全体) 反復の収束判定値 EPSNO、それぞれの方程式の準ニュートン反復の残差確認用収束判定値 EPSN, EPSNL, EPSNP, EPSNU、それぞれの方程式内部の ICCG あるいは BCG 反復収束判定値 (乗数 EPSDIV, EPSDIL, EPSDIP, DPSDIU で割って作る) は、ゲート長 $L_g = 0.1, 0.2[\mu\text{m}]$ を変えても同じ値を使う。第 2 段目のソルバ毎の残差確認用収束判定値と、内部反復用収束判定値は、Table 2.3 になる。

Table 2.3 Eps. of Solvers (Step: SUB2)

	Name	Solver	pseud-Newton(EPSN)	(EPSN/EPSSDIV)	(EPSSDIV)
	Gummel		1.6D-5 (EPSNO)	-	-
$\psi^{(k+1)}$	POISON	MICCG(1,3)	0.5D-9	1.0D-12	(0.5D3)
$n^{(k+1)}$	NINPUT	BCGSTAB(1,3)	0.5D-9	1.0D-11	(0.5D2)
$p^{(k+1)}$	PINPUT	BCGSTAB(1,3)	1.0D-5	2.0D-7	(0.5D2)
$U_{tn}^{(k+1)}$	UTNINP	BCGSTAB(1,3)	0.5D-5	0.4D-11	(1.25D6)

特に、 $(HSE)_\beta$ モデルでは、2段階あみ目法においてさえ、2段目の初期値の選択によって大きくガンメル反復の収束計算回数が違って来る。例えば、 $(HSE)_\beta$ モデルでは、式 (2.12) により $\nu_n^{(k+1)}$ を計算する $(HS)_\beta$ モデルとは違い、エネルギーバランス方程式 UTNINP を解いた $U_{tn}^{(k+1)}$ から $\nu_n^{(k+1)}$ に換算した値を式 (2.12) の代わりに代入し更新する。この時、初期値 $\nu_n^{(1)}$ としては、2段階あみ目法の第1段の結果をあみ目数2倍(第2段の所望のあみ目)に補間した $\nu_n^{(0)}$ を使う場合と、同じく第1段の結果を2倍にした $U_{tn}^{(0)}$ を ν_n に換算 (TN2MEN) した値を使う場合の2通りが考えられる。Table 2.4 にシミュレーション結果を示すように、この2段目の初期値の選択によるだけで、ガンメル反復の収束回数 (kcount) が大きく違う。今後、シミュレーション比較は、ゲート長 $L_g = 0.1[\mu\text{m}]$ と $L_g = 0.2[\mu\text{m}]$ で行なう。その結果、ゲート長 $L_g = 0.1[\mu\text{m}]$ では初期値 $\nu_n^{(0)}$ の方が4倍収束が速く、 $L_g = 0.2[\mu\text{m}]$ では初期値 $U_{tn}^{(0)}$ が2倍収束が速いことが分かる。ただし、ドレイン電子電流 I_d などの結果は、両初期値の場合において0.001%以下の精度で一致する(詳しくは、後でCV法の説明でふれる)。ゲート長 $L_g = 0.1[\mu\text{m}]$ においては、初期値 $\nu_n^{(1)}$ として、1段あみ目の初期値 $\nu_n^{(0)}$ を選んだ方が有利であることが分かる。したがって、今後は、 $(HSE)_\beta$ モデルにおいて、初期値 $\nu_n^{(1)}$ には、1段あみ目の初期値 $\nu_n^{(0)}$ を使う方を基本とする。

Table 2.4 Comparison of Gummel Iteration: kcount[times] for $\nu_n^{(1)}$ (Step: SUB2)

L_g	$\nu_n^{(1)} = \nu_n^{(0)}$, (Cpu Time[s])[ratio]	$\nu_n^{(1)} \leftarrow U_{tn}^{(0)}$, (Cpu Time[s])[ratio]	I_d [mA]
0.1	84 [times], (25) [(1.0)]	357 [times], (70) [(4.2)]	0.36993
0.2	145 [times], (37) [(1.0)]	72 [times], (23) [(0.49)]	0.18491

2段階あみ目法について説明する。2段階 (SUB2) で所望のあみ目の詳しさの半分のみ目、さらに収束判定値も2段階に比べ粗くしてシミュレーションし、2段階の初期値として利用する。初期値によっては、ガンメル反復が収束しない場合もあるからである。そのことは、1段階 (SUB1) でも状況は同じであるが、1段階では、ドレイン電圧を所望の $V_D = 2[\text{V}]$ とした上で、ゲート電圧は、所望の $V_G = 2[\text{V}]$ まで、 $V_G = 0[\text{V}]$ から $0.5[\text{V}]$ 刻みで徐々にあげていき、その解の連続性からガンメル反復が収束し易いようにシミュレーションのステップを工夫する。ドレイン電圧が所望の $V_D = 2[\text{V}]$ 、ゲート電圧が始めの $V_G = 0[\text{V}]$ の場合のシミュレーションをするときの初期値も、電位 ψ 、電子密度 n 等のデータ値 = 0.0D0 では、全く収束しないので、それらしい値を予め作っておく必要がある。2段階あみ目法において、今回のシミュレーションで設定した、1段階 (SUB1)、2段階 (SUB2) の、ガンメル反復収束判定値 (EPSNO)、それぞれのソルバにおける準ニュートン反復判定値 (EPSN) とその

BCG等の内部反復用判定値 (EPSN/EPSSDIV) のリストを Table 2.5 に示す。1 段目と 2 段目で、準ニュートン反復値 (EPSN) は変えないが、1 段目では、それを割る乗数 (EPSSDIV) を小さくすることで内部反復用判定値を粗くする。また、ゲート長 $Lg = 0.1, 0.2[\mu\text{m}]$ によって、収束判定値群は変えない。なお、所望のあみ目を元数 $n=44457$ とし、 x, y 方向のあみ目を半分にして 1 段目を行なうので、1 段目のあみ目数は、ほぼ 4 分の 1 の $n(1 \text{ 段目})=11118$ となる。

Table 2.5 Eps. of Solvers (Step: SUB1 and SUB2)

Step	n-Mesh		Solver	pseud-Newton(EPSN)	(EPSN/EPSSDIV)
SUB1	11118	Gummel		2.0D-3 (EPSNO)	-
SUB1	11118	$\psi^{(k+1)}$	MICCG(1,3)	0.5D-9	0.25D-10
SUB1	11118	$n^{(k+1)}$	BCGSTAB(1,3)	0.5D-9	0.5D-10
SUB1	11118	$p^{(k+1)}$	BCGSTAB(1,3)	1.0D-5	1.0D-6
SUB1	11118	$U_{tn}^{(k+1)}$	BCGSTAB(1,3)	0.5D-5	0.1D-10
SUB2	44457	Gummel		1.6D-5 (EPSNO)	-
SUB2	44457	$\psi^{(k+1)}$	MICCG(1,3)	0.5D-9	1.0D-12
SUB2	44457	$n^{(k+1)}$	BCGSTAB(1,3)	0.5D-9	1.0D-11
SUB2	44457	$p^{(k+1)}$	BCGSTAB(1,3)	1.0D-5	2.0D-7
SUB2	44457	$U_{tn}^{(k+1)}$	BCGSTAB(1,3)	0.5D-5	0.4D-11

次に、2 段階あみ目法の恩恵を具体的に見るために、手順どおり、2 段階あみ目法で行なった 2 本のシミュレーションと、1 段目に当たるシミュレーションを、始めから 2 段目の所望のあみ目数と 2 段階用の収束判定値で行ない直 1 本で済ますシミュレーションとを、比較したシミュレーション結果を Table 2.6 に示す。

Table 2.6 Merit of 2-Step(SUB1,SUB2) Mesh Rezoning

Lg	Model	n-Mesh	I_d [mA]	T_n [K]	kcount	CPU [s]	E_{xmax} [V]	Step
0.1	(HSE) $_{\beta}$	11118	0.44073	929	36	6	4.398	SUB1
0.1	(HSE) $_{\beta}$	44457	0.36993	985	84 [(1.0)]	22 [(1.0)]	4.973	SUB2
0.1	(HSE) $_{\beta}$	44457	0.36993	985	628 [(7.5)]	114 [(4.1)]	4.973	SUB1'
0.1	(HS) $_{\beta}$	11118	0.44642	3315	17	3	5.419	SUB1
0.1	(HS) $_{\beta}$	44457	0.42570	3332	28 [(1.0)]	7 [(1.0)]	5.186	SUB2
0.1	(HS) $_{\beta}$	44457	0.42570	3332	30 [(1.1)]	8 [(1.1)]	5.186	SUB1'
0.2	(HSE) $_{\beta}$	11118	0.21741	949	41	5	4.237	SUB1
0.2	(HSE) $_{\beta}$	44457	0.18491	1021	145 [(1.0)]	30 [(1.0)]	4.371	SUB2
0.2	(HSE) $_{\beta}$	44457	0.18491	1021	455 [(3.1)]	82 [(2.3)]	4.371	SUB1'
0.2	(HS) $_{\beta}$	11118	0.22782	2871	17	2	4.316	SUB1
0.2	(HS) $_{\beta}$	44457	0.21616	3025	26 [(1.0)]	6 [(1.0)]	4.697	SUB2
0.2	(HS) $_{\beta}$	44457	0.21616	3025	30 [(1.2)]	8 [(1.3)]	4.697	SUB1'

Table 2.6 には比較のために、全体のガンメル反復回数 (kcount[times])、CPU 時間 [s]、ドレイン電子電流 I_d [mA]、電子温度の最大値 T_{nmax} [K]、x 方向 (チャネル方向) の最大電圧 E_{xmax} [V] を示す。シミュレーションは、ドレイン電圧 $V_D = 2$ [V]、ゲート電圧 $V_G = 2$ [V] とし、ゲート長は、 $L_g = 0.1, 0.2$ [μm] の場合を行ない、 $(\text{HS})_\beta$ モデルと $(\text{HSE})_\beta$ モデル毎に収束状況の違いを見て、2 段階あみ目法の効用を確認した。

Table 2.7 Comparison of SUB2 Convergence for $(\text{HS})_\beta, (\text{HSE})_\beta$ Model ($L_g = 0.1, 0.2$ [μm])

L_g	Model	n-Mesh	I_d [mA]	T_n [K]	kcount	CPU [s]	$\frac{\text{CPU}}{\text{kcount}}$
0.1	$(\text{HSE})_\beta$	44457	0.3699	985	84 [(3.0)]	22	0.26
0.1	$(\text{HS})_\beta$	44457	0.4257	3332	28 [(1.0)]	7	0.25
0.2	$(\text{HSE})_\beta$	44457	0.1849	1021	145 [(5.6)]	30	0.21
0.2	$(\text{HS})_\beta$	44457	0.2161	3025	26 [(1.0)]	6	0.23

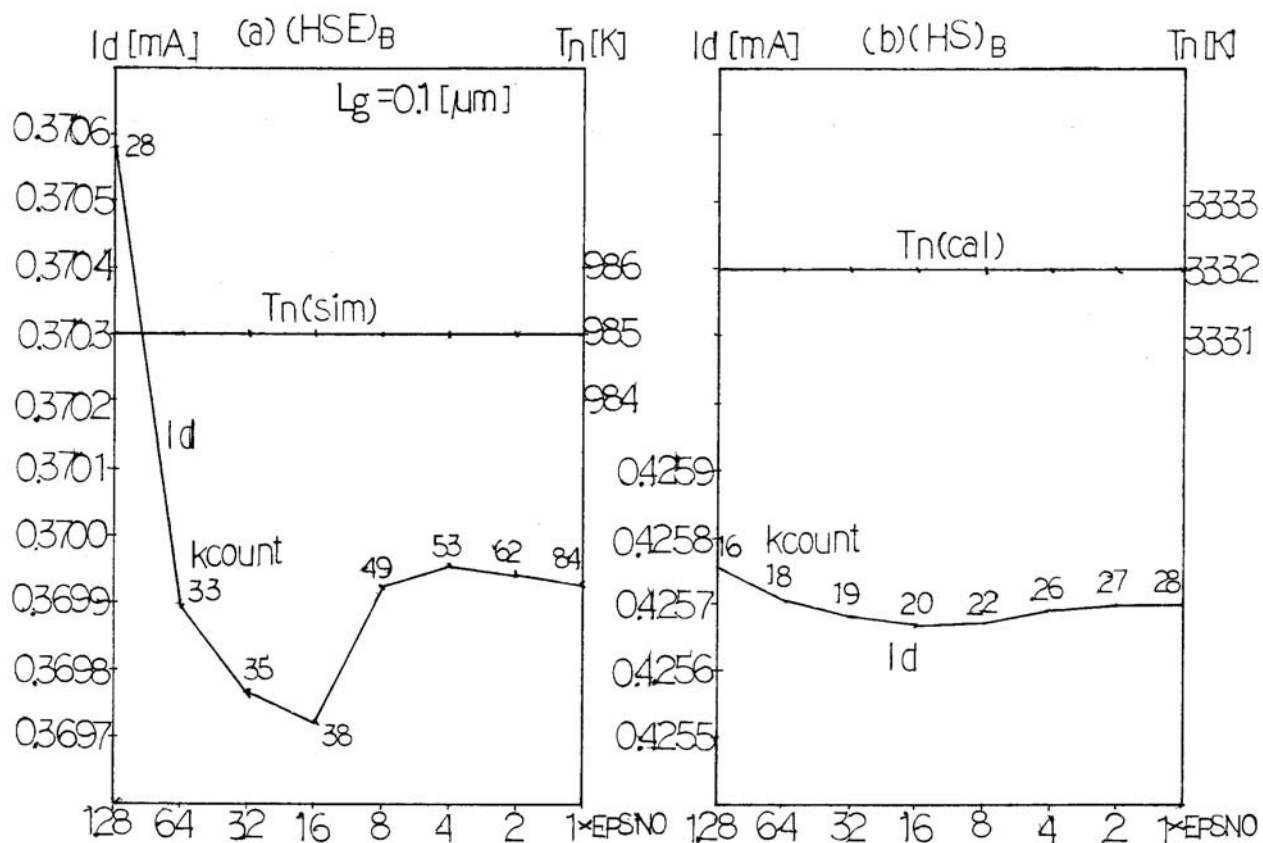


Fig.2.3 I_d Gummel Convergence for 48 mesh in $\text{EPSNO} = 1.6 \times 10^{-5}$ ($L_g = 0.1 \mu\text{m}$)

Table 2.6 の結果によれば、 $(\text{HS})_\beta$ モデルではメリットはないように見えるが、解きづらい $(\text{HSE})_\beta$ モデルでは、直接に精しいあみ目で解くと (SUB1'), 2 段階あみ目法に比べ、収束回数は 5 倍程度増え (L_g による)、それにつれて CPU 時間も 3 倍程度増える。2 段階あみ目法では、直接解いた 1 段の CPU 時間に対して、1 段と 2 段の合計 CPU 時間が全体

の CPU 時間になるわけだが、第 2 段の初期値を求めるための第 1 段の CPU 時間は 5 秒程度であるので、特に $(HSE)_\beta$ モデルにおいては、2 段全体に占める割合は小さい。この結果により、村田が指摘したように 2 段階あみ目法は、n-MOS シミュレーションに必須であることが確認できる。 $(HS)_\beta$ モデル、 $(HSE)_\beta$ モデルとも、あみ目の精しさが増えると、ドレイン電子電流 I_d は下がり、電子温度の最大値 T_{nmax} は上がる。

Table 2.6 から、2 段階あみ目法の第 2 段 SUB2 を抜き出し、ゲート長 $L_g = 0.1, 0.2[\mu m]$ 毎に、 $(HS)_\beta$ モデルと $(HSE)_\beta$ モデルを比較したものが、Table 2.7 である。Table 2.7 を見るように、CPU 時間を全体のガンメル反復回数で割った $\frac{CPU}{kcount}$ は、モデル $(HS)_\beta, (HSE)_\beta$ を変えても、ゲート長 $L_g = 0.1, 0.2[\mu m]$ を変えても、ガンメル反復 1 回当たりほぼ同じ $0.3[s/times]$ 秒であることが分かる。

このとき、ガンメル反復収束判定値 EPSNO までの途中の収束状況を EPSNO の 128 倍から 1 倍まで追って、その時のドレイン電子電流値 $I_d[mA]$ に収束のよし悪しを代表させて調べた。Fig2.3 がゲート長 $L_g = 0.1[\mu m]$ の場合で、Fig2.4 がゲート長 $L_g = 0.2[\mu m]$ の場合ある。いずれの図も、(a) が $(HSE)_\beta$ モデルの結果で、(b) が $(HS)_\beta$ モデルの結果を示す。これらの図からは、ガンメル反復収束判定値 $EPSNO=1.6 \cdot 10^{-5}$ で、有効数字 4 桁までは充分であることが分かる。

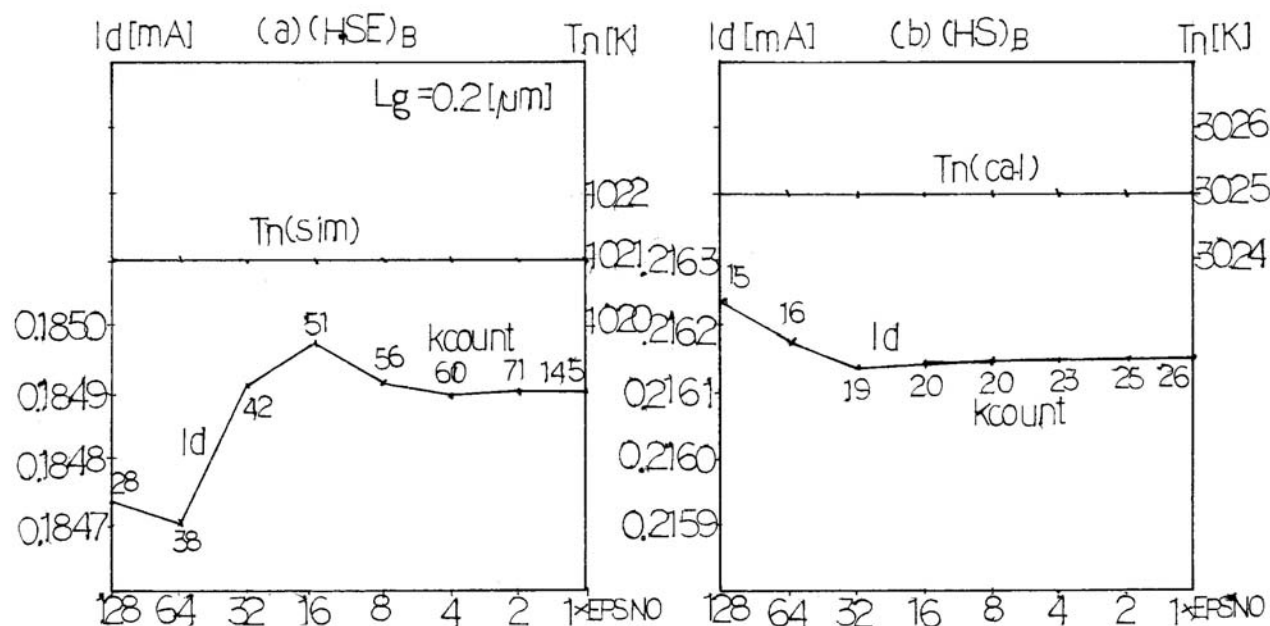


Fig.2.4 I_d Gummel Convergence for 48 mesh in $EPSNO=1.6D-5(L_g = 0.2[\mu m])$

グラフの測定点に沿って示してある数字は、ガンメル反復回数の通し数であり、ドレイン電子電流 I_d 計算値が変動するグラフの振動は、収束が難しいことを示す。グラフは、最終収束判定値 EPSNO の 128 倍から 1 倍までの途中の収束判定値における I_d の途中結果を示す。 $L_g = 0.1, 0.2[\mu m]$ とともに、 $(HS)_\beta$ モデルではうまく収束するが、電子のエネルギーバランスを組み込んだ $(HSE)_\beta$ モデルでは収束がかなり大変であることが分かる。電子温度

U_{tn} を解く 1 本のバランス方程式が増えるだけで、反復回数は 5 倍程度増え、それにつれて CPU 時間も増え収束状況も振動する。

各図 (Fig2.3, Fig2.4) の右側のスケールは、電子温度 T_n [K] を表わし、電子温度 T_n 値の収束の推移も示した。このとき (HS) $_{\beta}$ モデルにおいては、途中の収束判定値時点での式 (2.8) による T_n 計算値 (cal) を示し、(HSE) $_{\beta}$ モデルにおいては、途中の判定値時点のシミュレーション値 (sim) を示してある。電子温度 T_n [K] 値は、収束推移においてドレイン電子温度 I_d [mA] のようには、有効数字 4 桁の範囲内で変動は全くしない。結論として (HS) $_{\beta}$ モデルの方が安定で解き易く、(HSE) $_{\beta}$ モデルの方が解きづらいことが分かった。

2.5 CV 法と保存則

CV (Control Volume) 法と保存則について説明する。全体のガンメル反復は、収束判定値 EPSNO=1.6D-5 として、ポアソン方程式の相対残差を見て収束を決める。初期値としては、所望のゲート電圧 V_G まで、ゲート電圧 $V_G = 0.0$ [V] から 0.5 [V] ずつ上げていくなどの初期値を作るプロセス (第 1 段目) が必要となる。反復スキームの初期値には、解に近い値を使わないと収束しないので、離散化の最終的な精しさを半分にした粗いあみ目で解を求めておいて、それを初期値に使うような 2 段階あみ目法が是非とも必要になる。

$\psi^{(k+1)}$, $n^{(k+1)}$, $p^{(k+1)}$, $U_{tn}^{(k+1)}$ ((HSE) $_{\beta}$ のみ) を求める微分方程式は、村田が薦める保存則を満足する積分方程式に立ち返って、忠実に離散化する CV 法を使って解く。電子の電流連続式 (1.2) の $\nabla\psi$ に付いている場による量 μ_n などは、切り離すことはできない。また、メモリ、計算時間の節約に実務上必要な不均等あみ目の場合、 μ_n など場による量がある場合には、微分方程式から出発した離散化式と CV 法による離散化式が違う場合があり、CV 法でないと正しく解けない。

Table 2.8 Conservation of flux in CV Method
for (HS) $_{\beta}$, (HSE) $_{\beta}$ Model ($L_g = 0.1, 0.2$ [μm], $V_D = 2.0$ [V], $V_G = 2.0$ [V])

L_g	Model	I_d [mA]	I_{sub} [mA]	I_s [mA]	$I_d + I_{sub}$	Error [%]
0.1	(HSE) $_{\beta}$	0.369931	0.021107	0.391038	0.391038	0.0
0.1	(HS) $_{\beta}$	0.425699	0.064184	0.489883	0.489983	0.0
0.2	(HSE) $_{\beta}$	0.184906	0.006793	0.191701	0.191700	0.001
0.2	(HS) $_{\beta}$	0.216159	0.038483	0.254640	0.254642	0.001

n-MOS のデバイスシミュレーションにおいて、

- (a) ドレイン電子電流 I_d [mA] (ドレイン電極に沿った電子電流 J_n の線積分)
- (b) 基板正孔電流 I_{sub} [mA] (バックゲート電極に沿った正孔電流 J_p の線積分)
- (c) ソース電子電流 I_s [mA] (ソース電極に沿った電子電流 J_n の線積分)

の各電流は、物理的には、

$$(2.13) \quad I_s(c) = I_{sub}(b) + I_d(a)$$

となっているはずである。そこで積分系保存則を満足するように離散化する CV 法において、式 (2.13) の電流保存関係が、シミュレーション結果上で成り立っているかどうか調べた。

ドレイン電圧 $V_D = 2.0[V]$ 、ゲート電圧 $V_G = 2.0[V]$ において、ゲート長 $L_g = 0.1, 0.2[\mu\text{m}]$ とし、 $(\text{HSE})_\beta$ モデルと $(\text{HS})_\beta$ の両方で比較を行なった (Table 2.8)。

この Table 2.8 の結果によれば、どのケースも電流 I_s と $I_{sub} + I_d$ が 0.001 % 以下の精度で一致していることが分かる。この時、収束判定値 $\text{EPSNO} = 1.6\text{D-5}$ であるので、積分形式保存則を満足するように差分化する CV 法の特質が、シミュレーションによって確認されたことになる。

2.6 ポアソン方程式におけるガンメルの線形化

$\psi^{(k+1)}$ を解くポアソン方程式は、中心差分による離散化により対称行列方程式になるので、ソルバは MICCG(1,3) を使う。この時、ポアソン方程式は、ガンメルが発明した「線形化」を施して変形した方程式にしないと、右辺の電子密度 n 、正孔密度 p が、 $e^{\frac{e}{kT}\psi}$ の非線形性を持つために解けない。

拡散系の方程式をもつ、ポアソン方程式 (1.1)((2.14) と同じ) 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:

$$(2.14) \quad \text{div}[-\epsilon\nabla\psi] = e(p - n - Na + Nd)$$

は、 ψ について、熱方程式の温度 u と同様に、

$$(2.15) \quad \mathbf{A}\psi = \mathbf{F}$$

の形に CV 法により離散化できる。しかし、右辺 \mathbf{F} の $e(p - n - Na + Nd)$ の電荷 p や n に、 $e^{\frac{e}{kT}\psi}$ (T :温度、 k :ボルツマン定数) の形の非線形性を持つために、(2.14) 式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、(2.14) 式を

$$(2.16) \quad \text{div}[-\epsilon\nabla\psi^{(k)}] = \mathbf{F}_0 + \frac{\partial\mathbf{F}}{\partial\psi}\delta; \quad \psi^{(k)} - \psi^{(k-1)} = \delta, \quad \mathbf{F}_0 = e(p - n - Na + Nd)$$

として、

$$(2.17) \quad \text{div}[-\epsilon\nabla\psi^{(k)}] - \frac{\partial\mathbf{F}}{\partial\psi}\psi^{(k)} = \mathbf{F}_0 - \frac{\partial\mathbf{F}}{\partial\psi}\psi^{(k-1)}; \quad \frac{\partial\mathbf{F}}{\partial\psi} = -e \cdot \frac{e}{kT}(p^{(k)} + n^{(k)})$$

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 (2.17) は、

$$(2.18) \quad [\text{div}(-\epsilon\nabla) + e(\nu_p p^{(k)} + \nu_n n^{(k)})]\psi^{(k+1)} = e(\nu_p p^{(k)} + \nu_n n^{(k)})\psi^{(k)} + e(p^{(k)} - n^{(k)} + C)$$

と整理できる。もちろん我々は、前式を CV 法にしたがって離散化する。

$$(2.19) \quad \int_{\Gamma} (-\epsilon\nabla\psi^{(k)}) \cdot \mathbf{ndS} - \int_{\Omega} \frac{\partial\mathbf{F}}{\partial\psi}\psi^{(k)} d\mathbf{V} = \int_{\Omega} (\mathbf{F}_0 - \frac{\partial\mathbf{F}}{\partial\psi}\psi^{(k-1)}) d\mathbf{V}$$

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

また、電子密度 $n^{(k+1)}$ 、正孔密度 $p^{(k+1)}$ 、電子温度 $U_{tn}^{(k+1)}$ を解く移流拡散方程式は、移流項があるために離散化すると非対称行列方程式になるので BCGSTAB(1,3) を使う。この差分には、指数差分法が是非とも必要になる。拡散項と移流項の係数の比であるセルペクレ数が 2 以上で、中心差分は近似になり、そのためセルペクレ数が 2 以上では中心差分では解けない。

(HSE) $_{\beta}$ モデルにおいて、エネルギーバランス方程式を解いて求めた離散格子点上の電子温度 U_{tn} から、電子電流の連続方程式を解く NINPUT などを使う面電子温度 ν_n へは、離散化時に ν_n 値を一定値とする面の 4 隅の格子点温度 U_{tn} を平均して換算し、次式のように変換する。

$$(2.20) \quad \nu_{n_i} = \frac{4}{U_{tn_i} + U_{tn_{i-m}} + U_{tn_{i-m-1}} + U_{tn_{i-1}}}, \quad \left(\nu_n = \frac{1}{U_{tn}} \right) \quad [V^{-1}]$$

3 エネルギーバランス方程式の解法 ((HSE) $_{\beta}$)

拡張されたドリフト拡散モデル (HS) $_{\beta}$ に、エネルギーバランス方程式だけを入れたモデルを「エネルギー輸送モデル」と呼び、電子だけのエネルギーバランス方程式を入れた (HSE) $_{\beta}$ は、そのモデルに相当する。

ホットエレクトロン効果を含む、ホットエレクトロン効果をシミュレーションするのに必要な電子のエネルギー輸送方程式 (エネルギーバランス方程式) は、ボルツマンの輸送方程式から、

$$(3.1) \quad \frac{\partial(n\omega)}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{s} + e\mathbf{F} \cdot \mathbf{v}_d n + \left(\frac{\partial(n\omega)}{\partial t} \right)_C, \quad \mathbf{F} = (\nabla\psi)$$

となる。ここで、 n は電子密度、 ψ は電位、 \mathbf{s} はエネルギー流量で、

$$(3.2) \quad \mathbf{s} = \mathbf{J}_{\omega} = n \mathbf{v}_d \omega + \mathbf{v}_d n k_B T + n \mathbf{q}$$

ここで、 \mathbf{v}_d : ドリフト速度、 ω : キャリヤの平均エネルギー、 $n \mathbf{q}$: 熱流量、 T : 電子温度、 k_B : ボルツマン定数

また、 $\left(\frac{\partial(n\omega)}{\partial t} \right)_C$ は衝突項で、エネルギー緩和レート $\nu_{\omega}(\omega)$ を使って、

$$(3.3) \quad \left(\frac{\partial(n\omega)}{\partial t} \right)_C = -n \nu_{\omega}(\omega)(\omega - \omega_0)$$

と書ける。 $\nu_{\omega}(\omega)$ はエネルギー緩和時間 $\tau_{\omega}(\omega)$ の逆数で、 $\nu_{\omega}(\omega) = \frac{1}{\tau_{\omega}(\omega)}$ [s $^{-1}$] の関係がある。この $\nu_{\omega}(\omega)$ は、文献 [1] の P164 にあるモンテカルロ計算から得られた結果に則して、

$$(3.4) \quad \nu_{\omega}(\omega_e) = \nu_{\omega_0} \left(\frac{20\omega_e^8}{1 + 20\omega_e^8} \right) = \nu_{\omega_0} \left(\frac{20\left(\frac{3}{2}U_{tn}\right)^8}{1 + 20\left(\frac{3}{2}U_{tn}\right)^8} \right), \quad \omega_e = \frac{3}{2}U_{tn} \quad [\text{eV}]$$

$$\nu_{\omega_0} = \frac{1}{0.4} \quad [\text{ps}^{-1}]$$

とする。キャリアの平均エネルギーが主に熱によるとして、

$$\omega = \frac{3}{2}k_B T_n = \frac{3}{2}eU_{tn} \text{ [V]}$$

となり、[eV] 単位で $\nu_\omega(\omega)$ を、点温度 U_{tn} で表わすと式 (3.4) となる。式 (3.4) のグラフは、横軸に ω_e [eV] を取り、Fig3.1 のようになる。この $\nu_\omega(\omega_e)$ のモデルは、エネルギー輸送方程式の収束に不可欠で、 $\nu_\omega(\omega_e)$ を一定値: $\nu_{\omega_0} = \frac{1}{0.4} \text{ [ps}^{-1}\text{]}$ でシミュレーションしても収束しない。式 (3.4) は、Fig3.1 によれば、

$\nu_\omega(\omega_e) = 0.1 \text{ [eV]} (\approx 773 \text{ [K]})$ 近くで、一定値: $\nu_{\omega_0} = 2.5 \text{ [ps}^{-1}\text{]}$ になる。

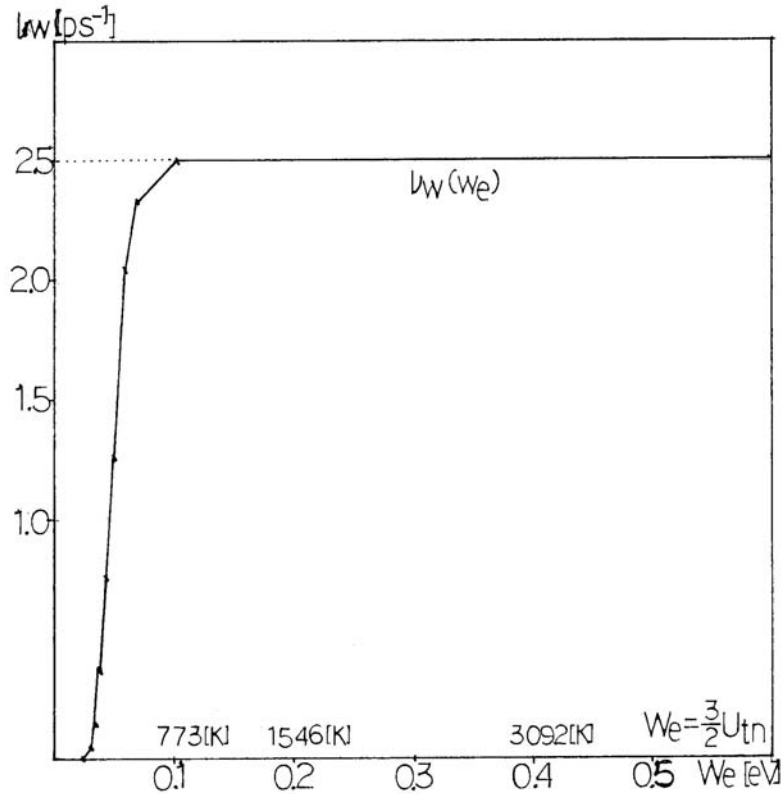


Fig.3.1 Numerical Model of $\nu_\omega(\omega_e)$

式 (3.1) は、定常解の場合には、

$$(3.5) \quad \nabla \cdot \mathbf{s} = e\mathbf{F} \cdot \mathbf{v}_d n + \left(\frac{\partial(n\omega)}{\partial t} \right)_C, \quad \mathbf{F} = (\nabla\psi)$$

となる。式 (3.5) は、CV 法の前になる保存則を満足する積分方程式としては、エネルギー流量 \mathbf{s} に対して、領域 Ω の表面 Γ からの流出量 (左辺) は、領域 Ω 内でのエネルギー発生量 (右辺) に等しい、という次式の物理量の保存則を表わす。

$$(3.6) \quad \int_{\Gamma} \mathbf{s} \cdot \mathbf{ndS} = \int_{\Omega} \left(e\mathbf{F} \cdot \mathbf{v}_d n + \left(\frac{\partial(n\omega)}{\partial t} \right)_C \right) dV$$

ガウスの発散公式を使って、式 (3.6) は、

$$(3.7) \quad \int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{s} \, dV = \int_{\Omega} \left(e \mathbf{F} \cdot \mathbf{v}_d n + \left(\frac{\partial(n\omega)}{\partial t} \right)_C \right) dV$$

と変形でき、積分を外せば、式 (3.5) となるわけである。

式 (3.2) の \mathbf{s} の中の熱流量 $n \mathbf{q}$ は、熱伝導率 κ を使い、Wiedemann-Franz の法則によれば、

$$(3.8) \quad n \mathbf{q} = -\kappa \nabla T, \quad \kappa \approx \frac{5}{2} \left(\frac{k_B}{e} \right)^2 \sigma T$$

と近似できる。したがって、式 (3.5) は、次式となる。

$$(3.9) \quad \nabla \cdot [n \mathbf{v}_d \omega + \mathbf{v}_d n k_B T - \kappa \nabla T] = e (\nabla \psi) \cdot \mathbf{v}_d n - (n \nu_{\omega}(\omega_e)(\omega - \omega_0))$$

電気伝導度 σ は、電流 \mathbf{J} と電場 \mathbf{E} の比例係数で、電気伝導の定常状態では、次の、 $\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E} = n e (\mathbf{v}_d) = n e (\mu \mathbf{E})$ の関係があるので、

$$(3.10) \quad \sigma = n e \mu = \frac{n e^2}{m} \tau_{pn}, \quad \mu \text{ はモビリティ、} \tau_{pn} \text{ は運動量の緩和時間、} m \text{ は電子質量}$$

となる。式 (3.10) の関係は、厳密には、運動量のバランス方程式を解くことによって求まる。式 (3.10) を式 (3.8) に代入して、熱伝導率 κ は、

$$(3.11) \quad \kappa = \frac{5 k_B^2 n T \mu}{2 e}$$

となる。

キャリアとして、電子を考えれば、

$$(3.12) \quad \mathbf{J}_n = -en \mathbf{v}_d = -e \mathbf{J}_n^D = -e[-D_n \nabla n + (\mu_n \nabla \psi)n]$$

となり、電子密度 n の移流拡散方程式 (1.2) は、

$$(3.13) \quad \text{div} \begin{bmatrix} \mathbf{J}_n \\ -e \end{bmatrix} = GR = \text{div} \begin{bmatrix} \mathbf{J}_n^D \\ -e \end{bmatrix}$$

と書ける。これより、

$$n \mathbf{v}_d = \mathbf{J}_n^D$$

を使って、式 (3.9) の右辺を書き直せば、

$$(3.14) \quad \nabla \cdot [-\kappa \nabla T_n + n \mathbf{v}_d \omega + \mathbf{v}_d n k_B T_n] = +e \mathbf{J}_n^D \cdot (\nabla \psi) - (n \nu_{\omega}(\omega_e)(\omega - \omega_0))$$

となる。式 (3.14) は、電子温度 T_n を解く移流拡散方程式になっている。我々は、キャリアエネルギーが主に熱エネルギーであり、

$$(3.15) \quad \omega = \frac{3}{2} k_B T = \frac{3}{2} e U_{tn} \text{ [V]}, \quad \omega_e = \frac{3}{2} U_{tn} \text{ [eV]}$$

という関係があることを使って、式 (3.14) を、電子温度 T_n ではなく、格子点温度 U_{tn} として求める式に変形すれば (κ は式 (3.11) を使う)、解くべき移流拡散方程式は、 U_{tn} について次のようになる。

$$\text{div} \left[-\frac{5}{2} n \mu_n^{LISF} U_{tn}^{(k-1)} \nabla U_{tn}^{(k)} + \frac{5}{2} \mathbf{J}_n^D U_{tn}^{(k)} \right] = Ru \left(\mathbf{J}_n^D \cdot (\nabla \psi) - \frac{3}{2} n \cdot \nu_\omega (U_{tn}^{(k-1)}) (U_{tn}^{(k-1)} - U_{T_0}) \right) \quad (3.16)$$

$$0.0 \leq Ru \leq 1.0, \quad U_{T_0} \equiv \frac{k_B T_l}{e} = \frac{k_B (300\text{K})}{e} = \frac{1}{38.68} = \frac{1}{\nu_0}$$

式 (3.16) において、パラメータ Ru を導入した。この Ru は、電子温度 U_{tn} を厳密に解かない拡張したドリフト拡散モデルである $(\text{HS})_\beta$ モデルにおけるパラメータ： γ_T に相当するパラメータであり、 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。このパラメータ Ru は、 γ_T に相当しており、電子温度 T_n に関係し、 γ_T 同様、パラメータ変化の範囲内で電子電流 I_d には関係なく、 I_d 値で 3% 程度しか変わらない。

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 ($\mathbf{A}U = \mathbf{F}$) の行列 \mathbf{A} の対角項 a_0 が負 ($a_0 < 0$) になり、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 のチューニング値とする。

$$Ru = Ru_{max}$$

ゲート長 $Lg = 0.2[\mu\text{m}]$ では $Ru_{max} = 0.076$ 、ゲート長 $Lg = 0.1[\mu\text{m}]$ では $Ru_{max} = 0.068$ となる。したがって、 $(\text{HS})_\beta$ 、 $(\text{HSE})_\beta$ モデルにおけるパラメータ群は、Table 3.1 となる。

Table 3.1 Parameters for $(\text{HS})_\beta$, $(\text{HSE})_\beta$ Model

Model	Para1	Para2	Para3
$(\text{HSE})_\beta$	β	γ_F [I_d tune]	$Ru(Ru_{max})$ [T_n tune]: $Lg=0.2(0.076), Lg=0.1(0.068)$
$(\text{HS})_\beta$	β	γ_F [I_d tune]	γ_T [T_n tune]

かくして、 $(\text{HSE})_\beta$ モデルの電子温度 T_n のチューニングパラメータは、 Ru_{max} となる。これまでの各 $(\text{HS})_\beta$ 、 $(\text{HSE})_\beta$ モデルにおけるチューニングパラメータ群を整理すると、Table 3.2 のようになる。

- (1) パラメータ β は、モビリティ $\mu_{n,p}^{LIS}$ にユニバーサルリティを与えるパラメータ ($\beta = 0.5$) である。各モデル、ゲート長 Lg にも共通で同値である。
- (2) ドレイン電子電流 I_d 値をチューニングする、モビリティ $\mu_{n,p}^{LISF}$ の計算に関係するドライビングフォースのパラメータ： γ_F は、各モデル、ゲート長 Lg にも共通で同値。
- (3) γ_T は、 $(\text{HS})_\beta$ モデルにおいて、計算よって得る電子温度 T_n をチューニングするパラメータである。 $(\text{HS})_\beta$ モデルにおいて、正孔温度 T_p の計算にも、電子温度をチューニングした時の γ_T を共通に同値で使う。すなわち $\gamma_T(T_n) = \gamma_T(T_p)$ である。ゲート長 Lg にも共通で同値である。

(4)したがって、電子のバランス方程式だけ解く (HSE) $_{\beta}$ モデルの電子温度 T_n のチューニングは、パラメータ Ru_{max} で行なうが、もう一方の (HSE) $_{\beta}$ モデルの正孔温度 T_p の計算 (HS) $_{\beta}$ モデルと同式)には、(HS) $_{\beta}$ モデルにおいて使う γ_T と同値を使う。ゲート長 L_g にも共通で同値である。

Table 3.2 Parameter Values for (HS) $_{\beta}$, (HSE) $_{\beta}$ Model ($L_g = 0.1, 0.2[\mu\text{m}]$)

L_g	Model	$\gamma_T(T_n)$	$\gamma_T(T_p)$	$Ru_{max}(T_n)$	γ_F	$Tn_{max}[\text{K}]$	$Tp_{max}[\text{K}]$	Id [mA]	β
0.1	(HSE) $_{\beta}$	-	0.257	0.068	0.38	985	1669	0.3699	0.5
0.1	(HS) $_{\beta}$	0.257	0.257	-	0.38	3332	1669	0.4257	0.5
0.2	(HSE) $_{\beta}$	-	0.257	0.076	0.38	1021	1633	0.1849	0.5
0.2	(HS) $_{\beta}$	0.257	0.257	-	0.38	3025	4000	0.2161	0.5

4 シミュレーション場

Fig.4.1のように、n-MOSデバイスの横 (x 方向) $1.3[\mu\text{m}] \times$ 縦 (y 方向) $1.1[\mu\text{m}]$ の部分を切り出しシミュレーション場として、グラフ上はそれを、横 (x) $13[\text{cm}] \times$ 縦 (y) $11[\text{cm}]$ と表わす。左隅にソース電極、中央下にゲート電極、右隅にドレイン電極を配置し、上側がバックゲート電極となる。Fig.4.1は、ソース電圧 $V_S = 0.0[\text{V}]$ 、ゲート電圧 $V_G = 2.0[\text{V}]$ 、ドレイン電圧 $V_D = 2.0[\text{V}]$ の場合の、シミュレーションによる電位 ψ の分布を表わす。Fig.4.1は、ゲート長 $L_g = 0.2[\mu\text{m}]$ の場合であるが、ゲート長 $L_g = 0.1[\mu\text{m}]$ の場合は、ドナー $N_d(n-)$ のドーピングの先頭を $0.5[\mu\text{m}]$ ずつ内側にずらす。

離散化は、実務上必要な不均等あみ目を使い、村田が勧める、グラフ上の $1[\text{cm}]$ を MJ 分割することとし、チャネル等の大事な所は MJ を大きくし精しく解く。反転層ができるゲート部分の横 (x) 方向の分割数 MK を、グラフ上の $1[\text{cm}]$ 当たり 24 あるいは 20 にして精しくして、両側は粗く $1[\text{cm}]$ 当たり 6、次の内側は 16 と徐々に精しくしていく。縦 (y) 方向も同様に、グラフ上の $1[\text{cm}]$ 当たりの分割数 MJ を、 SiO_2 の膜 (ゲート電極と反転層の間) では 100 分割、反転層では $1[\text{cm}]$ 当たり 48 等に精しくする。バックゲート付近に近づくとつれ、分割数 MJ=4,2,1 と粗くしていく。こうして全体のあみ目数は、

$$M2(x \text{ 方向}) : 219 \times M1(y \text{ 方向}) : 203 = 44457$$

となる。離散化により、CV 法では、元数 $N=44457$ の行列方程式となる。この元数 N の計算は、最終の所望のあみ目数 (2 段目) において、Fig.4.1 の記法によれば、

$$N = M2 \times M1,$$

$$M2 = 2 \times (MK_B + MK_C + MK_0 + 2 \times MK_1 + MKF_1/2 + MKF_2/2 + MKL/2) - 1,$$

$$M1 = MJ_0 + MJF_0/4 + MJF_1/4 + MJF_2/2 + MJ + MJ_1 + MJ_2 + MJ_3 + MJ_4 + MJ_5 + MJ_6 + MJ_7 + MJM$$

となる。ここで、それぞれの分割数は (x 方向は MK 系列、 y 方向は MJ 系列)、

$$MK_B = 6, MK_C = 16, MK_0 = 16, MK_1 = 20, MKF_1 = 20, MKF_2 = 24, MKL = 20,$$

$$MJ_0 = 100, MJF_0 = 48, MJF_1 = 32, MJF_2 = 24, MJ = 20, MJ_1 = 16, MJ_2 = 12, MJ_3 = 8, MJ_4 = 6, MJ_5 = 4,$$

$$MJ_6 = 2, MJ_7 = 2, MJM = 1$$

となる。

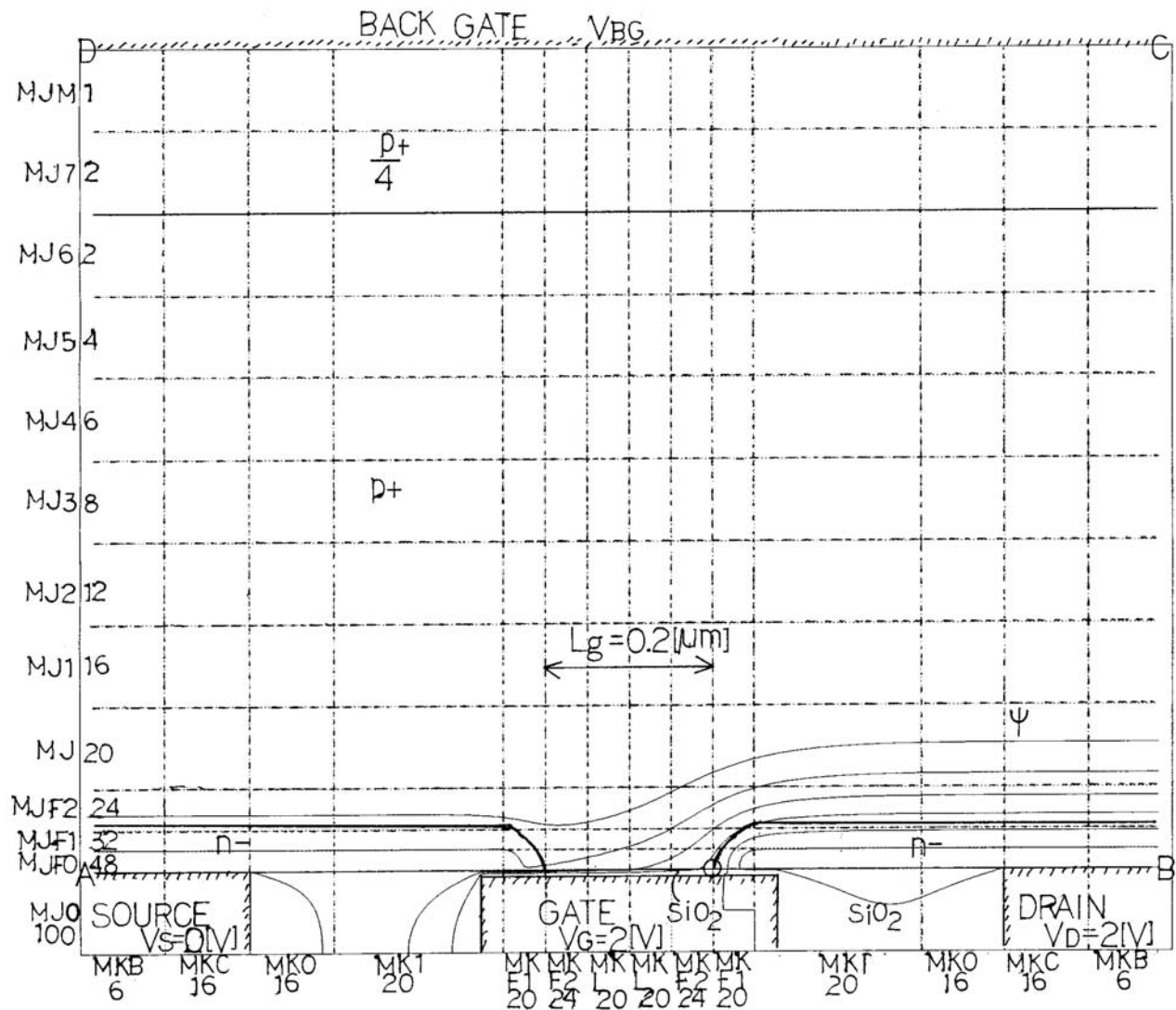


Fig.4.1 ψ Distribution in Simulation Field ($L_g = 0.2[\mu\text{m}]$, $(\text{HSE})_\beta$ Model)

こうして離散化して、その中の離散点1点Aを取り、拡大したものがFig4.2 aである。中心の節点*i*点に対して、 ψ_i , n_i , p_i , $U_{tn_i}(T_{n_i})$ など方程式で解く数値は、格子点上の数値で与え、それ以外の、面温度 $\nu_{n,p}$ 、モビリティ $\mu_{n,p}$ などは、Fig4.2 aの面ABCDに対して与え、代表点Pを使い、 $\nu_{n,p}$ などの表記で表わす。離散化の時には、格子点上の値か、面で与えられた値かを注意しながら離散化する。 $(\text{HSE})_\beta$ モデルにおいてエネルギーバランスを解くUTNINPは、各点で U_{tn_i} を計算し、 $(\text{HSE})_\beta$ 、 $(\text{HS})_\beta$ モデルに共通な他の計算では、面温度 ν_{n_i} を使う。 ν_{n_i} は、面で与えるので、UTNINPで求めた格子点上の U_{tn_i} は、 ν_{n_i} に換算して使う(TN2MEN)。Fig4.2 aの点Pがある面ABCDでの面温度 $\nu_{n,p}$ は、面ABCDの四隅の格子点の U_{tn} 値の平均値の逆数として、

$$(4.1) \quad \nu_{n,p} = \frac{4}{U_{tn_i} + U_{tn_{i-m}} + U_{tn_{i-m-1}} + U_{tn_{i-1}}}, \quad \left(\nu_n = \frac{1}{U_{tn}} \right) \quad [\text{V}^{-1}]$$

と変換する(式(2.20)と同じ)。Fig.4.1において、チャンネルのドレイン端で SiO_2 界面の

印の点は、 $(HS)_\beta$ モデルにおいて、電子温度 T_n から、パラメータ γ_T をチューニングする場所を示す。

このように、中心の節点 i 点に対して、 $\psi_i, n_i, p_i, Utn_i(Tn_i)$ などの物理量を割り当て、解も十字に隣り合う合計 5 点だけを離散化に際しては考える。 i 点の上の点は節点番号は $i+1$ 、下は $i-1$ 、 y (縦) 方向の離散化数が $m = M1$ なので、必ず、左側の点の節点番号は $i-m$ 、右側の節点番号は $i+m$ になっている。したがって、 x (横) 方向の格子列番号を j 列、 y (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。離散化時に、CV 法の基本式となる積分方程式 (例えば式 (3.6)) の領域 Ω は、Fig4.2 a の破線で囲む 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: $h_{x+} = \frac{1}{MKx_+}$ 、 $h_{y-} = \frac{1}{MJy_-}$ 等から求まる。電極やバックゲート上での節点は、Fig4.2 a の領域の半分になるので、そのように積分する。電極やバックゲートは、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。

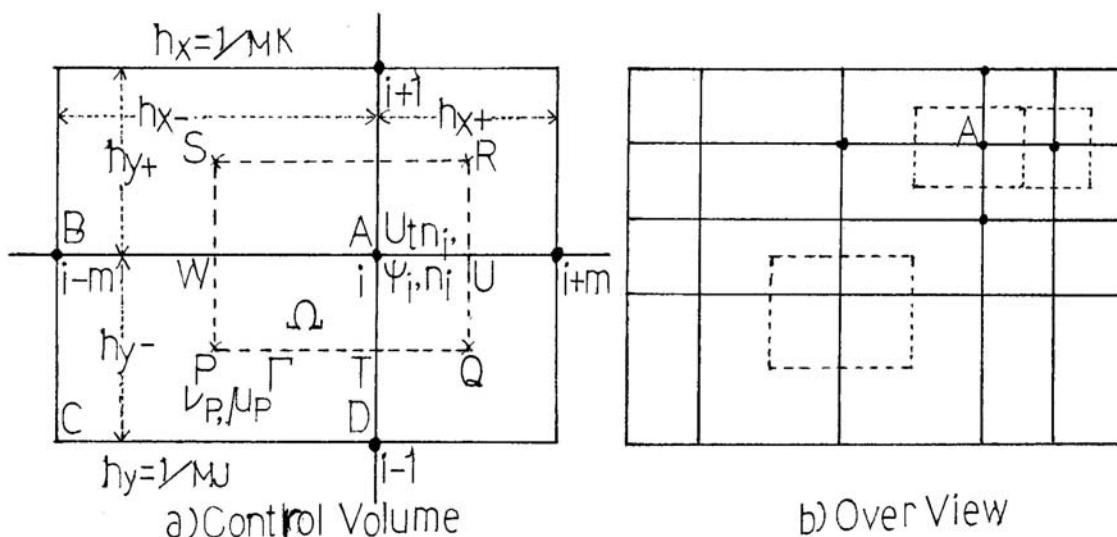


Fig.4.2 Mesh for CV Method in A point

5 CV 法

$$(5.1) \quad div[-\kappa \nabla u + \mu \mathbf{b}u] = f$$

の形の移流拡散方程式の場合で説明する。電子 n キャリヤの場合には、 $\kappa = D_n$ 、 $\mathbf{b} = (\nabla \psi)$ に対応している。 $\mathbf{b} = 0$ 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。 $\mathbf{b} \neq 0$ 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、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 (5.1) の元の、保存則を満足する積分方程式：

$$(5.2) \quad \int_{\Gamma} (-\kappa \nabla u + \mu \mathbf{b}u) \cdot \mathbf{n} dS = \int_{\Omega} f dV$$

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 (5.2) の線積分を離散化するとき、

$$(5.3) \quad \nabla u \text{ を } \frac{u_h - u_0}{h}, \quad u \text{ を } \frac{u_h + u_0}{2}$$

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、セルペクレ数 (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、ソース電子電流 I_s は、ドレイン電子電流 I_d と基板正孔電流 I_{sub} の和：

$$I_s = I_d + I_{sub}$$

物理的にになっているべきものであるが、シミュレーション結果でも 0.001 % 以下の精度で一致する (全体の収束判定値：EPSNO=1.6D-5)。

中心差分による、式 (5.2) の離散化の手順を説明する。Fig.4.2 a の小領域 PQRS の回りに、左辺は、

$$(5.4) \quad \int_{\Gamma} (-\kappa \nabla u + \mu \mathbf{b}u) \cdot \mathbf{n} ds = \int_{PQ} + \int_{QR} + \int_{RS} + \int_{SP}$$

となり、

$$(5.5) \quad \int_{PQ} \doteq \left(-d_P \left(\frac{u_i - u_{i-1}}{hy_-} \right) + \mu_P \cdot b_y \left(\frac{u_i + u_{i-1}}{2} \right) \right) (-1) \frac{hx_-}{2} \\ + \left(-d_Q \left(\frac{u_i - u_{i-1}}{hy_-} \right) + \mu_Q \cdot b_y \left(\frac{u_i + u_{i-1}}{2} \right) \right) (-1) \frac{hx_+}{2}$$

などとして書き下す。ここで、T 点での $\frac{\partial u}{\partial y}$ は $\frac{u_i - u_{i-1}}{hy_-}$ 、同様に u_i は $\frac{u_i + u_{i-1}}{2}$ 、W 点での $\frac{\partial u}{\partial x}$ は $\frac{u_i - u_{i-m}}{hx_-}$ 、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、メッシュで区分けし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(5.5)のように、式(5.4)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：

$$(5.6) \quad a_{i,i-m}u_{i-m} + a_{i,i-1}u_{i-1} + a_{i,i}u_i + a_{i,i+1}u_{i+1} + a_{i,i+m}u_{i+m} = f_i$$

ができる。この時、式(5.6)の左辺の係数は、次式となる。

$$(5.7) \quad \begin{aligned} a_{i,i} &= \frac{1}{2} \left[d_P \frac{hx_-}{hy_-} \left(1 - \frac{\mu_P b_y hy_-}{2d_P} \right) + d_Q \frac{hx_+}{hy_-} \left(1 - \frac{\mu_Q b_y hy_-}{2d_Q} \right) \right] \\ &+ \frac{1}{2} \left[d_Q \frac{hy_-}{hx_+} \left(1 + \frac{\mu_Q b_x hx_+}{2d_Q} \right) + d_R \frac{hy_+}{hx_+} \left(1 + \frac{\mu_R b_x hx_+}{2d_R} \right) \right] \\ &+ \frac{1}{2} \left[d_R \frac{hx_+}{hy_+} \left(1 + \frac{\mu_R b_y hy_+}{2d_R} \right) + d_S \frac{hx_-}{hy_+} \left(1 + \frac{\mu_S b_y hy_+}{2d_S} \right) \right] \\ &+ \frac{1}{2} \left[d_S \frac{hy_+}{hx_-} \left(1 - \frac{\mu_S b_x hx_-}{2d_S} \right) + d_P \frac{hy_-}{hx_-} \left(1 - \frac{\mu_P b_x hx_-}{2d_P} \right) \right] \\ a_{i,i-m} &= -\frac{1}{2} \left[d_S \frac{hy_+}{hx_-} \left(1 + \frac{\mu_S b_x hx_-}{2d_S} \right) + d_P \frac{hy_-}{hx_-} \left(1 + \frac{\mu_P b_x hx_-}{2d_P} \right) \right] \\ a_{i,i-1} &= -\frac{1}{2} \left[d_P \frac{hx_-}{hy_-} \left(1 + \frac{\mu_P b_y hy_-}{2d_P} \right) + d_Q \frac{hx_+}{hy_-} \left(1 + \frac{\mu_Q b_y hy_-}{2d_Q} \right) \right] \\ a_{i,i+1} &= -\frac{1}{2} \left[d_R \frac{hx_+}{hy_+} \left(1 - \frac{\mu_R b_y hy_+}{2d_R} \right) + d_S \frac{hx_-}{hy_+} \left(1 - \frac{\mu_S b_y hy_+}{2d_S} \right) \right] \\ a_{i,i+m} &= -\frac{1}{2} \left[d_Q \frac{hy_-}{hx_+} \left(1 - \frac{\mu_Q b_x hx_+}{2d_Q} \right) + d_R \frac{hy_+}{hx_+} \left(1 - \frac{\mu_R b_x hx_+}{2d_R} \right) \right] \end{aligned}$$

ここで、係数 $a_{i,t}$ は、行列 $A(a_{i,t})$ の要素と対応しており、行 i は Fig.4.1 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.4.1 では、 A の行列サイズは： $n = m2(x \text{ 方向}) \times m(y \text{ 方向}) : m = m1$ となる。均等あみ目の場合には、 $hx_{\pm} = hy_{\pm}$ となる。なお、 b が場に寄る量であれば、例えば $\mu_Q b_x hx_+$ の b_x は、

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

として、 $\mu_Q b_x^U hx_+$ に置き変わる。この行列 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。 $b=(b_x, b_y)=(0,0)$ 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、対称行列用ソルバでよく解き易くなり、CPU 時間も非対称帯行列に比べ $\frac{1}{3}$ でよくなる。

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。

$$\begin{aligned} &\text{すべての節点 } i \text{ につき、} \quad a_i > 0 \quad \text{かつ} \quad a_{i\pm 1} \leq 0, \quad a_{i\pm m} \leq 0 \\ &\text{となるようにせよ。} \end{aligned}$$

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、

$$(5.8) \quad \left| \frac{\mu b_x h_x}{\kappa} \right| \leq 2, \quad \left| \frac{\mu b_y h_y}{\kappa} \right| \leq 2$$

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、指数法を用いなければならない。

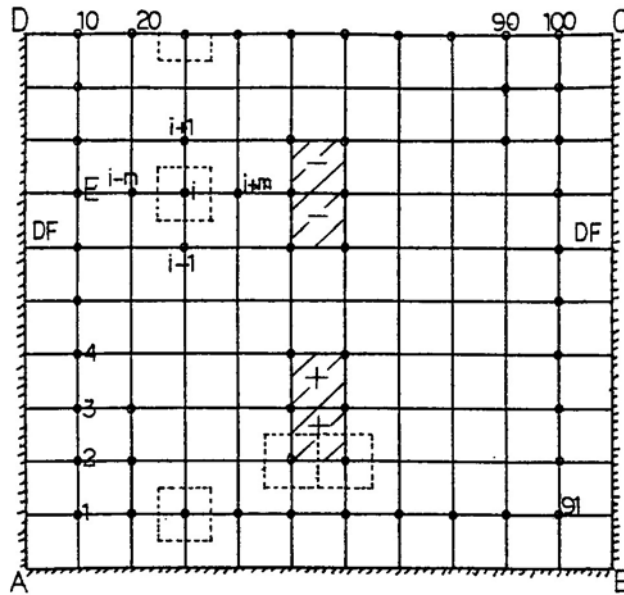


Fig.5.1 Simulation Field in Thermal Sample for Drift Diffusion Eq.

例えば、Fig.5.1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(フラックスが0)、左、右、下の一辺が温度 $u = 0.0$ [] の固定境界を持ち、熱源として中央下側に + の熱源: $+0.2 \frac{\text{cal}}{\text{sec}}$ 、相反して中央上側に - の熱源: $-0.2 \frac{\text{cal}}{\text{sec}}$ を与えた時 (Fig5.1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 (5.1) :

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

にしたがって、中心差分とこれから述べる指数差分を用いシミュレーションした結果を Fig.5.2 に示す。左が中心差分で、右が指数差分の結果で、温度分布 $u(x, y)$ を等高線表示してある。このとき、式 (5.1) において、

$$\mathbf{b} = (b_x, b_y) = (0, 1) \quad \text{すなわち } y \text{ 方向だけで } b_y = 1$$

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、均等あみ目として場を設定する。

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

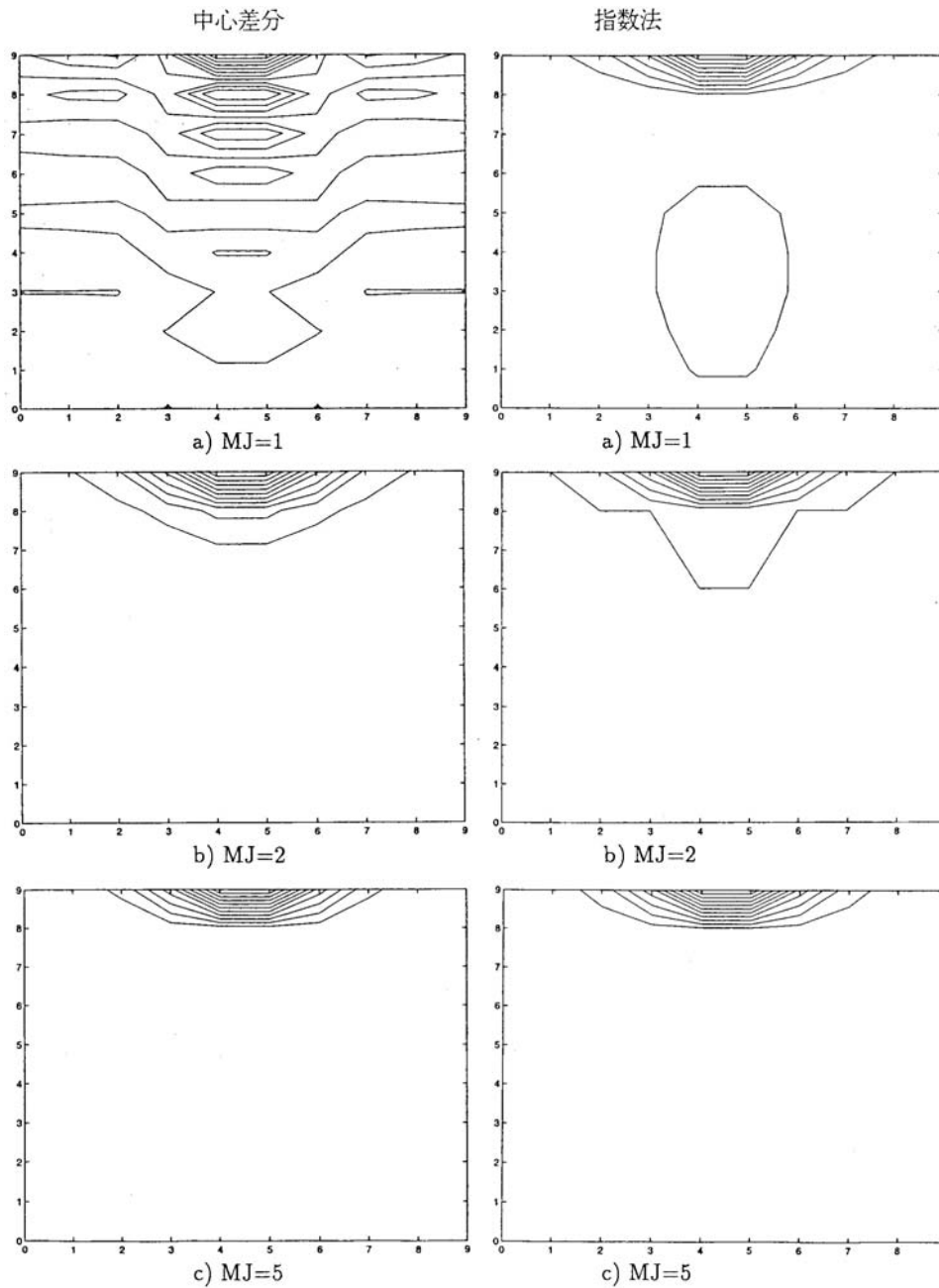


Fig.5.2 u_{min} , u_{max} Distribution Cent. and Exp method for MJ=1,2,5 ($C_0=10, by=1, DF=1$)

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

$$n = m_2(x \text{ 方向}) \times m(y \text{ 方向}), \quad m = MJ \times 10, \quad m_2 = MJ \times 11 - 1: (m = m_1)$$

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、 $b=(bx, by)=(0,1)$ なので、 y 方向だけ考えればよく、

$$(5.9) \quad \left| \frac{\mu b_y h_y}{\kappa} \right| = \frac{C_0}{MJ} \leq 2$$

となる。

今、 $C_0 = 10$ と固定し、あみ目の分割数 MJ を、1,2,5 と変えてシミュレーションした結果が Fig.5.2 である。このとき、セルペクレ数は、MJ=1,2,5 に対して、 $\frac{C_0}{MJ} = 10, 5, 2$ と変化する。したがって、左図の中心差分で解いた結果は、MJ=1,2 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と正確に一致して、正常に解は求まる。

Table 5.1 u_{min} , u_{max} Convergence for $\frac{C_0}{MJ}$ ($C_0=10, by=1, MJ=1,2,5, DF=1$)

MJ	Mesh	u_{min} []	u_{max} []	$\frac{C_0}{MJ}$
1	Central	-0.7099	0.4177	10
1	Exp.	-0.3232	0.0509	10
2	Central	-1.1812	0.4717	5
2	Exp.	-0.4555	0.0428	5
5	Central	-0.8150 (30 %)	0.0352 (0.9 %)	2
5	Exp.	-0.6243 (1.0)	0.0349 (1.0)	2
10	Central	-0.7261 (8 %)	0.0324 (0 %)	1
10	Exp.	-0.6719 (1.0)	0.0324 (1.0)	1
20	Central	-0.6804 (2 %)	0.0309 (0.9 %)	0.5
20	Exp.	-0.6667 (1.0)	0.0309 (1.0)	0.5

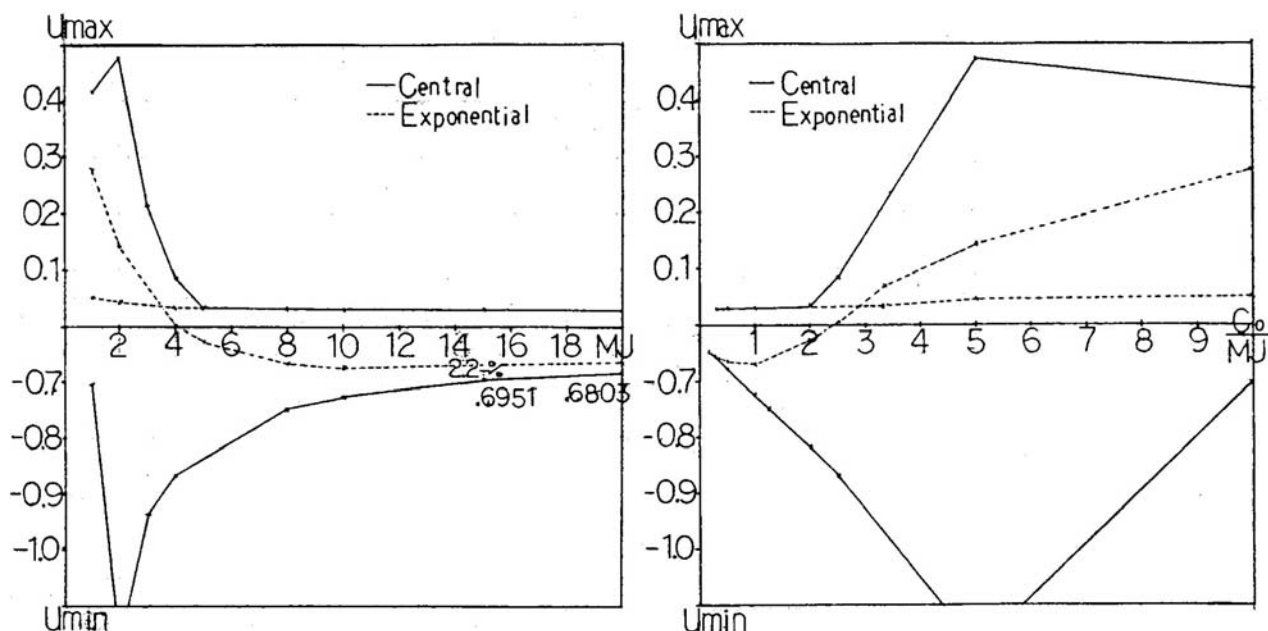


Fig.5.3a u_{min} , u_{max} Distribution for MJ Fig.5.3b u_{min} , u_{max} Dist. for $\frac{C_0}{MJ}$ ($C_0=10, by=1, DF=1$)

Fig.5.2 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 5.1 になる。Table 5.1 は、Fig.5.2 で見るように、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.5.3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.5.3 aは、横軸はMJで、Fig.5.3 bは、横軸がセルペクレ数になっており、実線は中心差分、点線は指数差分の結果を示す。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。

6 指数差分(指数法)

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。

$div(-d\nabla u + \mu bu) = f$ (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、 $\frac{d}{dx}(-d\frac{du}{dx} + \mu bu) = 0$, $u(0) = u_0, u(h) = u_h$ とすると、 $\omega = \frac{\mu b}{d}$ とおく時、

$$(6.1) \quad u(x) = u_0 + (u_h - u_0) \frac{\exp(\omega x) - 1}{\exp(\omega h) - 1}$$

の解析解がある。この式から、flux を計算すると、

$$(6.2) \quad -d\frac{du}{dx} + \mu bu = \mu b \left[u_0 - \frac{u_h - u_0}{\exp(\omega h) - 1} \right] = \mu b \left[u_0 - \frac{(u_h - u_0)B(\omega h)}{\omega h} \right]$$

ここで、 $B(z)$ はベルヌーイ関数で、 $B(z) = \frac{z}{e^z - 1}$, $1 + \frac{B(z)}{z} = \frac{B(-z)}{z}$
この flux を使って、前掲の Fig.4.2 a 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)：

$$(6.3) \quad \int_{\Gamma} (-d\nabla u + \mu bu) \cdot \mathbf{n} ds = \int_{\Omega} f dv$$

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。

$$(6.4) \quad \int_{\Gamma} (-d\nabla u + \mu bu) \cdot \mathbf{n} ds = \int_{PQ} + \int_{QR} + \int_{RS} + \int_{SP}$$

係数 d, μ, \mathbf{b} などが、もっと場に精しく寄る時には、

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

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と同様に次式として始末し、節点 i での f_i を求める。

$$(6.5) \quad f_i = \int_{\Omega} f dv = f_P \frac{hx_-}{2} \frac{hy_-}{2} + f_Q \frac{hx_+}{2} \frac{hy_-}{2} + f_R \frac{hx_+}{2} \frac{hy_+}{2} + f_S \frac{hx_-}{2} \frac{hy_+}{2} \quad \left[\frac{\text{cal}}{\text{sec}} \right]$$

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 $u_i \ u_{i-m} \ u_{i-m-1} \ u_{i-1}$ 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: $b = (b_x^T \ b_y^T)^T$ の y 成分を表わす。)

$$(6.6) \quad \int_{PQ} = \int_{PT} + \int_{TQ} = \mu_P b_y^T \left[u_{i-1} - \frac{u_i - u_{i-1}}{\exp(\omega_{Py} h y_-) - 1} \right] \cdot [0 \ -1]^T \frac{h x_-}{2} +$$

$$\mu_Q b_y^T \left[u_{i-1} - \frac{u_i - u_{i-1}}{\exp(\omega_{Qy} h y_-) - 1} \right] \cdot [0 \ -1]^T \frac{h x_+}{2}$$

$$= -\mu_P b_y^T \left[u_{i-1} - \frac{(u_i - u_{i-1}) B(\omega_{Py} h y_-)}{\omega_{Py} h y_-} \right] \cdot \frac{h x_-}{2} - \mu_Q b_y^T \left[u_{i-1} - \frac{(u_i - u_{i-1}) B(\omega_{Qy} h y_-)}{\omega_{Qy} h y_-} \right] \cdot \frac{h x_+}{2}$$

$$(6.7) \quad \int_{QR} = \int_{QU} + \int_{UR} = \mu_Q b_x^U \left[u_i - \frac{u_{i+m} - u_i}{\exp(\omega_{Qx} h x_+) - 1} \right] \cdot [1 \ 0]^T \frac{h y_-}{2} +$$

$$\mu_R b_x^U \left[u_i - \frac{u_{i+m} - u_i}{\exp(\omega_{Rx} h x_+) - 1} \right] \cdot [1 \ 0]^T \frac{h y_+}{2}$$

$$= \mu_Q b_x^U \left[u_i - \frac{(u_{i+m} - u_i) B(\omega_{Qx} h x_+)}{\omega_{Qx} h x_+} \right] \cdot \frac{h y_-}{2} + \mu_R b_x^U \left[u_i - \frac{(u_{i+m} - u_i) B(\omega_{Rx} h x_+)}{\omega_{Rx} h x_+} \right] \cdot \frac{h y_+}{2}$$

$$= \left[\mu_Q b_x^U u_i - d_Q \frac{(u_{i+m} - u_i)}{h x_+} B(\omega_{Qx} h x_+) \right] \cdot \frac{h y_-}{2} + \left[\mu_R b_x^U u_i - d_R \frac{(u_{i+m} - u_i)}{h x_+} B(\omega_{Rx} h x_+) \right] \cdot \frac{h y_+}{2}$$

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

$$(6.8) \quad \int_{RS} = \int_{RV} + \int_{VS} = \mu_R b_y^V \left[u_i - \frac{u_{i+1} - u_i}{\exp(\omega_{Ry} h y_+) - 1} \right] \cdot [0 \ 1]^T \frac{h x_+}{2} +$$

$$\mu_S b_y^V \left[u_i - \frac{u_{i+1} - u_i}{\exp(\omega_{Sy} h y_+) - 1} \right] \cdot [0 \ 1]^T \frac{h x_-}{2}$$

$$= \mu_R b_y^V \left[u_i - \frac{(u_{i+1} - u_i) B(\omega_{Ry} h y_+)}{\omega_{Ry} h y_+} \right] \cdot \frac{h x_+}{2} + \mu_S b_y^V \left[u_i - \frac{(u_{i+1} - u_i) B(\omega_{Sy} h y_+)}{\omega_{Sy} h y_+} \right] \cdot \frac{h x_-}{2}$$

$$(6.9) \quad \int_{SP} = \int_{SW} + \int_{WP} = \mu_S b_x^W \left[u_{i-m} - \frac{u_i - u_{i-m}}{\exp(\omega_{Sx} h x_-) - 1} \right] \cdot [-1 \ 0]^T \frac{h y_+}{2} +$$

$$\mu_P b_x^W \left[u_{i-m} - \frac{u_i - u_{i-m}}{\exp(\omega_{Px} h x_-) - 1} \right] \cdot [-1 \ 0]^T \frac{h y_-}{2}$$

$$= -\mu_S b_x^W \left[u_{i-m} - \frac{(u_i - u_{i-m}) B(\omega_{Sx} h x_-)}{\omega_{Sx} h x_-} \right] \cdot \frac{h y_+}{2} - \mu_P b_x^W \left[u_{i-m} - \frac{(u_i - u_{i-m}) B(\omega_{Px} h x_-)}{\omega_{Px} h x_-} \right] \cdot \frac{h y_-}{2}$$

以上の式から、式 (6.4) 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：

$$(6.10) \quad a_{i,i-m} u_{i-m} + a_{i,i-1} u_{i-1} + a_{i,i} u_i + a_{i,i+1} u_{i+1} + a_{i,i+m} u_{i+m} = f_i$$

ができる。この時、式 (6.10) の左辺の係数は、次式となる。

$$\begin{aligned}
a_{i,i} &= \frac{1}{2} \left[d_P \frac{hx_-}{hy_-} B(\omega_{Py} hy_-) + d_Q \frac{hx_+}{hy_-} B(\omega_{Qy} hy_-) \right] \\
&+ \frac{1}{2} \left[d_Q \frac{hy_-}{hx_+} B(-\omega_{Qx} hx_+) + d_R \frac{hy_+}{hx_+} B(-\omega_{Rx} hx_+) \right] \\
&+ \frac{1}{2} \left[d_R \frac{hx_+}{hy_+} B(-\omega_{Ry} hy_+) + d_S \frac{hx_-}{hy_+} B(-\omega_{Sy} hy_+) \right] \\
&+ \frac{1}{2} \left[d_S \frac{hy_+}{hx_-} B(\omega_{Sx} hx_-) + d_P \frac{hy_-}{hx_-} B(\omega_{Px} hx_-) \right] \\
a_{i,i-m} &= -\frac{1}{2} \left[d_S \frac{hy_+}{hx_-} B(-\omega_{Sx} hx_-) + d_P \frac{hy_-}{hx_-} B(-\omega_{Px} hx_-) \right] \\
a_{i,i-1} &= -\frac{1}{2} \left[d_P \frac{hx_-}{hy_-} B(-\omega_{Py} hy_-) + d_Q \frac{hx_+}{hy_-} B(-\omega_{Qy} hy_-) \right] \\
a_{i,i+1} &= -\frac{1}{2} \left[d_R \frac{hx_+}{hy_+} B(\omega_{Ry} hy_+) + d_S \frac{hx_-}{hy_+} B(\omega_{Sy} hy_+) \right] \\
a_{i,i+m} &= -\frac{1}{2} \left[d_Q \frac{hy_-}{hx_+} B(\omega_{Qx} hx_+) + d_R \frac{hy_+}{hx_+} B(\omega_{Rx} hx_+) \right]
\end{aligned} \tag{6.11}$$

$$\begin{aligned}
\omega_{Ry} &= \frac{\mu_R b_y^V}{d_R}, \quad \omega_{Sy} = \frac{\mu_S b_y^V}{d_S}, \quad \omega_{Qx} = \frac{\mu_Q b_x^U}{d_Q}, \quad \omega_{Rx} = \frac{\mu_R b_x^U}{d_R}, \quad \omega_{Py} = \frac{\mu_P b_y^T}{d_P}, \quad \omega_{Qy} = \frac{\mu_Q b_y^T}{d_Q}, \\
\omega_{Sx} &= \frac{\mu_S b_x^W}{d_S}, \quad \omega_{Px} = \frac{\mu_P b_x^W}{d_P}, \quad \nu_R = \frac{\mu_R}{d_R}, \quad \nu_S = \frac{\mu_S}{d_S}, \quad \nu_Q = \frac{\mu_Q}{d_Q}, \quad \nu_P = \frac{\mu_P}{d_P} \quad \text{など。}
\end{aligned}$$

(ここで、Fig.4.2 a 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.4.1 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 (6.11) の係数 $a_{i,i+m}$ の式において、ベルヌーイ関数 $B(z)$ のべき級数展開式:

$$B(z) = \frac{z}{e^z - 1} \simeq 1 - \frac{z}{2} + \frac{z^2}{12} - \dots \tag{6.12}$$

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

$$a_{i,i+m} = -\frac{1}{2} \left[d_Q \frac{hy_-}{hx_+} \left(1 - \frac{\omega_{Qx} hx_+}{2}\right) + d_R \frac{hy_+}{hx_+} \left(1 - \frac{\omega_{Rx} hx_+}{2}\right) \right] \tag{6.13}$$

は、中心差分式で作った $a_{i,i+m}$ の式と同式となる。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、 $d =$ 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、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、 $z = 0$ は除去可能の特異点で、式 (6.12) のべき級数展開式から、 $B(0) = 1$ 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 (6.12) を使い、次のような Function BER4(Z) で行なう。

FUNCTION BER4(z)

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

$$\text{if}(-10^{-2} < z < 10^{-2}) \text{ then } BER4(z) = 1 - (0.5 - 0.0833333 \cdot z) \cdot z$$

$$\text{if}(z > 10^{-2}) \text{ then } BER4(z) = \frac{z \cdot e^{-z}}{1 - e^{-z}} \quad ; \text{計算精度を上げるため}$$

この BER4(z) の計算と、中心差分 $B_{cent}(z) = 1 - 0.5z$ による計算値の差は、Table 6.1 のようになる。

Table 6.1 $B(z)$:Exp, $1 - 0.5z$:Cent for z

z	B(z) :exp	1-0.5z :cent
-4.0	4.075	3.0
-2.0	2.313	0.0
-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

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、

$$z = \omega \cdot hy = \frac{\mu \cdot by}{d} \cdot hy = C_0 \cdot by \cdot hy = \frac{C_0}{MJ} \cdot by = \text{セルペクレ数}$$

となり、 z はセルペクレ数と等しい。Table 6.1 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.6.1 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。

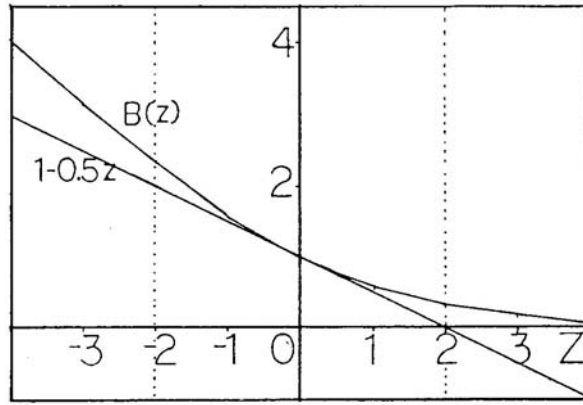


Fig.6.1 Plot of $B(z)$:Exp and $1 - 0.5z$:Cent

$div(-d\nabla u + \mu bu) = f$ 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(拡散方程式は中心差分で良い)、対称行列を解く ICCG のソルバが使える。

また、式 (6.10) の i 番方程式における境界条件の反映には、注意がいる。これら係数も、Fig.4.1 の上側のノイマン境界の節点 (CD 上) では、左辺の積分区間を Fig.4.2 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.4.2 の A 点が境界上 (CD 上) にあるとして、

$$(6.14) \quad \int_{\Gamma_{CD}} (-\kappa \nabla u + \mu bu) \cdot \mathbf{n} \, ds = \int_{WP} + \int_{PQ} + \int_{QU}$$

となり、あとは式 (5.5) 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。

また、節点 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。たとえば、Fig.4.1 のバックゲート上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、

$$(6.15) \quad a_{i,i} = 1.0, \quad a_{i,i-m} = a_{i,i-1} = a_{i,i+1} = a_{i,i+m} = 0.0, \quad (u_i = u_c)$$

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、

$$(6.16) \quad a_{i,i-m}u_{i-m} + a_{i,i-1}u_{i-1} + a_{i,i}u_i + a_{i,i+1}u_c + a_{i,i+m}u_{i+m} = f_i$$

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 の仲間に入れる。したがって、

$$(6.17) \quad a_{i,i-m}u_{i-m} + a_{i,i-1}u_{i-1} + a_{i,i}u_i + a_{i,i+m}u_{i+m} = f_i - a_{i,i+1}u_c$$

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 (5.7) 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。

Fig4.1の両側端は、ノイマン境界(フラックス=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、

$a_{i,i-m} = 0.0$ とした上で、フラックスを0にするために、
 $div(-\kappa\nabla u + \mu\mathbf{b}u) = f$ の離散式(6.11)において、 $\kappa = 0$, $\mu = 0$ としてしまい楽をする。

7 電子温度 U_{tn} (エネルギーバランス方程式) の離散化

電子温度 U_{tn} : $U_{tn} = \frac{k_B}{e} T_n = \frac{1}{\nu_n}$ [V] は、

$$(7.1) \quad div \left[-\frac{5}{2} n \mu_n U_{tn} \nabla U_{tn} + \frac{5}{2} \mathbf{J}_n^D U_{tn} \right] = \mathbf{J}_n^D \cdot (\nabla \psi) - \frac{3}{2} n \nu_{\omega n} (U_{tn} - U_{T_0})$$

にしたがう。ここで、 \mathbf{v}_d を、電子のドリフト速度として、

$$\mathbf{J}_n^D = [-D_n \nabla n + (\mu_n \nabla \psi) n] = [-\mu_n \nabla (n U_{tn}) + \mu_n (\nabla \psi) n] = \left[-\frac{\mu_n}{\nu_n} \nabla n + \mu_n (\nabla \psi) n \right]$$

$$(7.2) \quad div \left[\mathbf{J}_n^D \right] = GR = div \left[\frac{\mathbf{J}_n}{-e} \right] \quad (\text{式 (1.2)}), \quad \mathbf{J}_n = -en\mathbf{v}_d = -e\mathbf{J}_n^D, \quad \mathbf{J}_n^D = n\mathbf{v}_d$$

である。CV法の離散化の元になる積分形の式は、次式となる。

$$(7.3) \quad \int_{\Gamma} \left[-\frac{5}{2} n^{(k-1)} \mu_n^{LISF(k-1)} U_{tn}^{(k-1)} \nabla U_{tn}^{(k)} + \frac{5}{2} \mathbf{J}_n^{D(k-1)} U_{tn}^{(k)} \right] \cdot \mathbf{n} \, ds = Ru_{max} \cdot \int_{\Omega} \mathbf{J}_n^{D(k-1)} \cdot (\nabla \psi^{(k-1)}) - \frac{3}{2} n^{(k-1)} \nu_{\omega n} (U_{tn}^{(k-1)} - U_{T_0}) \, dv$$

式(7.3)の右辺の Ru_{max} は、(HS) $_{\beta}$ モデルのパラメータ γ_T に相当する T_n をチューニングするパラメータで、式(7.3)を離散式が行対角優位を保ち正常に計算できる最大値とする。

式(7.3)の左辺の積分は、Fig4.2 aのCV領域の周に沿って、

$$(7.4) \quad \int_{\Gamma} \left[-\frac{5}{2} n^{(k-1)} \mu_n^{LISF(k-1)} U_{tn}^{(k-1)} \nabla U_{tn}^{(k)} + \frac{5}{2} \mathbf{J}_n^{D(k-1)} U_{tn}^{(k)} \right] \cdot \mathbf{n} \, ds = \int_{PT} + \int_{TQ} + \int_{PW} + \int_{WS} + \int_{QU} + \int_{UR} + \int_{VR} + \int_{SV}$$

のように積分する。

式(7.3)において、 (k) 回目の反復計算をする際の、左辺の $\nabla U_{tn}^{(k)}$ と $U_{tn}^{(k)}$ のそれぞれ係数： $-\frac{5}{2} n \mu_n^{LISF} U_{tn}^{(k-1)}$ と $J_n^{D(k-1)}$ 、さらに、右辺の $\frac{3}{2} n \nu_{\omega n} (U_{tn}^{(k-1)} - U_{T_0})$ の計算についてふれておく。 $J_n^{D(k-1)}$ については、式(7.2)のように前回 $(k-1)$ 回目にも求めた $\nu_n^{(k-1)}$ を使って計算する。左辺の $-\frac{5}{2} n \mu_n^{LISF} U_{tn}^{(k-1)}$ と右辺の $\frac{3}{2} n \nu_{\omega n} (U_{tn}^{(k-1)} - U_{T_0})$ の計算については、前回 $(k-1)$ 回目にも求めた $U_{tn}^{(k-1)}$ をそのまま使って計算することもできるが、 $U_{tn} = \frac{1}{\nu}$ なので、 $U_{tn}^{(k-1)}$ を面温度 ν_n に換算した $\nu_n^{(k-1)}$ を使って計算することも考えられる。実際には、方程式を直接解いた $U_{tn}^{(k-1)}$ を使って離散化係数を作り $U_{tn}^{(k)}$ を計算した方が、収束が速く、CPU時間も2割程度速いことが分かる。詳細は離散化の時に個別に説明する。

Fig.4.2 a にしたがひ、式 (6.6) のように、指数 (ベルヌーイ) 差分による差分化で、 \int_{PT} を考えれば ($Ber(z)$ はベルヌーイ関数)、

$$\int_{PT} \rightarrow Z_y^{PT} = - \left[c_y^{PT} U_{tn_{i-1}} - \frac{Ber(\omega^{Py} \cdot h_{y-}) \cdot d^{PT} \cdot (U_{tn_i} - U_{tn_{i-1}})}{h_{y-}} \right] \cdot \frac{h_{x-}}{2}$$

$$(7.5) J_n^D = (J_x^{PW}, J_y^{PT}), \omega^{Py} = \frac{c_y^{PT}}{d^{PT}}, c_y^{PT} = \frac{5}{2} J_y^{PT}, d^{PT} = \frac{5}{2} \mu_n^P \left(\frac{n_i + n_{i-1}}{2} \right) \cdot U_{tn}^{PT(k-1)}$$

電子のモビリティ μ_n^P は、Fig.4.2 a の面 ABCD (代表点 P) で与える量で式 (2.3) により計算する。 $J_n^{D(k-1)}$ の計算には、式 (7.2) のように面温度 $\nu_n^{(k-1)}$ を使う。 n_i は i 点での電子密度を示す。ベルヌーイ関数: $Ber(Z)$ の引き数 $Z (= \omega_{Py} \cdot h_{y-})$ は、セルペクレ数となる。

式 (7.3) の両辺にある、 $U_{tn}^{(k-1)}$ (式 (7.4) では左辺の $U_{tn}^{PT(k-1)}$ に当たる) の計算には、

$$U_{tn}^{PT(k-1)} = \frac{U_{tn_i}^{(k-1)} + U_{tn_{i-1}}^{(k-1)}}{2} (= U_{tn}^{TQ(k-1)} : \text{この式では線積分 P(T)Q 上で同値})$$

を使う。求めた点温度 $U_{tn}^{(k-1)}$ から換算し面で与える $\nu_n^{P(k-1)}$ を使い、

$$U_{tn}^{PT(k-1)} = \frac{1}{\nu_n^{P(k-1)}} (\neq U_{tn}^{TQ(k-1)} = \frac{1}{\nu_n^{Q(k-1)}} : \text{線積分 TQ 上では異値})$$

と計算するよりも、 $U_{tn}^{PT(k-1)} = \frac{U_{tn_i}^{(k-1)} + U_{tn_{i-1}}^{(k-1)}}{2}$ を使った方が CPU 時間が 2 割程度速いので、本シミュレーションではこれを使う。また、式 (7.3) の両辺にある、 $n^{(k-1)}$ の計算には、 $U_{tn}^{(k-1)}$ の扱いと同様に、 $n^{PT(k-1)} = \frac{n_i^{(k-1)} + n_{i-1}^{(k-1)}}{2} = n^{TQ(k-1)}$ を使う。

式 (7.5) と同様にして、次のように離散化する。

$$\int_{TQ} \rightarrow Z_y^{TQ} = - \left[c_y^{TQ} U_{tn_{i-1}} - \frac{Ber(\omega^{Qy} \cdot h_{y-}) \cdot d^{TQ} \cdot (U_{tn_i} - U_{tn_{i-1}})}{h_{y-}} \right] \cdot \frac{h_{x+}}{2}$$

$$(7.6) \omega^{Qy} = \frac{c_y^{TQ}}{d^{TQ}}, c_y^{TQ} = \frac{5}{2} J_y^{TQ}, d^{TQ} = \frac{5}{2} \mu_n^Q \left(\frac{n_i + n_{i-1}}{2} \right) \cdot U_{tn}^{TQ}, U_{tn}^{TQ} = \frac{U_{tn_i} + U_{tn_{i-1}}}{2}$$

$$\int_{PW} \rightarrow Z_x^{PW} = - \left[c_x^{PW} U_{tn_{i-m}} - \frac{Ber(\omega^{Px} \cdot h_{x-}) \cdot d^{PW} \cdot (U_{tn_i} - U_{tn_{i-m}})}{h_{x-}} \right] \cdot \frac{h_{y-}}{2}$$

$$(7.7) \omega^{Px} = \frac{c_x^{PW}}{d^{PW}}, c_x^{PW} = \frac{5}{2} J_x^{PW}, d^{PW} = \frac{5}{2} \mu_n^P \left(\frac{n_i + n_{i-m}}{2} \right) \cdot U_{tn}^{PW}, U_{tn}^{PW} = \frac{U_{tn_i} + U_{tn_{i-m}}}{2}$$

$$\int_{WS} \rightarrow Z_x^{WS} = - \left[c_x^{WS} U_{tn_{i-m}} - \frac{Ber(\omega^{Sx} \cdot h_{x-}) \cdot d^{WS} \cdot (U_{tn_i} - U_{tn_{i-m}})}{h_{x-}} \right] \cdot \frac{h_{y+}}{2}$$

$$(7.8) \omega^{Sx} = \frac{c_x^{WS}}{d^{WS}}, c_x^{WS} = \frac{5}{2} J_x^{WS}, d^{WS} = \frac{5}{2} \mu_n^S \left(\frac{n_i + n_{i-m}}{2} \right) \cdot U_{tn}^{WS}, U_{tn}^{WS} = \frac{U_{tn_i} + U_{tn_{i-m}}}{2}$$

$$\int_{QU} \rightarrow Z_x^{QU} = \left[c_x^{QU} U_{tn_i} - \frac{Ber(\omega^{Qx} \cdot h_{x+}) \cdot d^{QU} \cdot (U_{tn_{i+m}} - U_{tn_i})}{h_{x+}} \right] \cdot \frac{h_{y-}}{2}$$

$$(7.9) \omega^{Qx} = \frac{c_x^{QU}}{d^{QU}}, c_x^{QU} = \frac{5}{2} J_x^{QU}, d^{QU} = \frac{5}{2} \mu_n^Q \left(\frac{n_{i+m} + n_i}{2} \right) \cdot U_{tn}^{QU}, U_{tn}^{QU} = \frac{U_{tn_{i+m}} + U_{tn_i}}{2}$$

$$\int_{UR} \rightarrow Z_x^{UR} = \left[c_x^{UR} U_{tn_i} - \frac{Ber(\omega^{Rx} \cdot h_{x+}) \cdot d^{UR} \cdot (U_{tn_{i+m}} - U_{tn_i})}{h_{x+}} \right] \cdot \frac{h_{y+}}{2}$$

$$(7.10) \omega^{Rx} = \frac{c_x^{UR}}{d^{UR}}, c_x^{UR} = \frac{5}{2} J_x^{UR}, d^{UR} = \frac{5}{2} \mu_n^R \left(\frac{n_{i+m} + n_i}{2} \right) \cdot U_{tn}^{UR}, U_{tn}^{UR} = \frac{U_{tn_{i+m}} + U_{tn_i}}{2}$$

$$\int_{VR} \rightarrow Z_y^{VR} = \left[c_y^{VR} U_{tn_i} - \frac{Ber(\omega^{Ry} \cdot h_{y+}) \cdot d^{VR} \cdot (U_{tn_{i+1}} - U_{tn_i})}{h_{y+}} \right] \cdot \frac{h_{x+}}{2}$$

$$(7.11) \omega^{Ry} = \frac{c_y^{VR}}{d^{VR}}, c_y^{VR} = \frac{5}{2} J_y^{VR}, d^{VR} = \frac{5}{2} \mu_n^R \left(\frac{n_{i+1} + n_i}{2} \right) \cdot U_{tn}^{VR}, U_{tn}^{VR} = \frac{U_{tn_{i+1}} + U_{tn_i}}{2}$$

$$\int_{SV} \rightarrow Z_y^{SV} = \left[c_y^{SV} U_{tn_i} - \frac{Ber(\omega^{Sy} \cdot h_{y+}) \cdot d^{SV} \cdot (U_{tn_{i+1}} - U_{tn_i})}{h_{y+}} \right] \cdot \frac{h_{x-}}{2}$$

$$(7.12) \omega^{Sy} = \frac{c_y^{SV}}{d^{SV}}, c_y^{SV} = \frac{5}{2} J_y^{SV}, d^{SV} = \frac{5}{2} \mu_n^S \left(\frac{n_{i+1} + n_i}{2} \right) \cdot U_{tn}^{SV}, U_{tn}^{SV} = \frac{U_{tn_{i+1}} + U_{tn_i}}{2}$$

以上の式から、式(7.4)の右辺の線積分8項全部を書き下だし、 $U_{tn_{i-m}}, U_{tn_{i-1}}, U_{tn_i}, U_{tn_{i+1}}, U_{tn_{i+m}}$ 項毎に整理すれば、式(6.10)のように第*i*番(格子点番号)方程式：

$$(7.13) \quad a_{i,i-m} U_{tn_{i-m}} + a_{i,i-1} U_{tn_{i-1}} + a_{i,i} U_{tn_i} + a_{i,i+1} U_{tn_{i+1}} + a_{i,i+m} U_{tn_{i+m}} = f_i$$

ができる(右辺については後で)。式(7.13)は、要素が5の帯行列方程式になっている。

式(7.5)の拡散係数 d^{PT} の離散化について、再度ふれておく。

$$(7.14) \quad d^{PT} = \frac{5}{2} \mu_n \cdot n \cdot U_{tn} = \frac{5}{2} \mu_n^P \left(\frac{n_i + n_{i-1}}{2} \right) \cdot U_{tn}^{PT}$$

\int_{PT} を線積分計算する時の、 $d^{PT} = \frac{5}{2} \mu_n \cdot n \cdot U_{tn}$ において、モビリティ μ_n は Fig.4.2 a の面 P($U_{tn_i}, U_{tn_{i-1}}, U_{tn_{i-m}}, U_{tn_{i-m-1}}$ が囲む面) で与え定義しているので、

$$\mu_n = \mu_n^P (\neq \mu_n^Q)$$

を使い、電子密度 n は、点温度 U_{tn} 同様に格子点で計算しているので、

$$n = \frac{n_i + n_{i-1}}{2} \equiv n^{PT} (= n^{TQ})$$

を使う。

一方、点温度 U_{tn} には、Fig.4.2 a の P 点での U_{tn}^P として、面で定義する面温度 ν_n^P (計算した U_{tn} から4点平均で換算計算する) を使い、

$$(1) U_{tn} = U_{tn}^P = \frac{1}{\nu_n^P} \equiv \frac{U_{tn_i} + U_{tn_{i-1}} + U_{tn_{i-m}} + U_{tn_{i-m-1}}}{4} \quad (\text{フラグ:IUKM1=0})$$

を使うことと、 n と同様に、

$$(2) U_{tn}^{PT} = \frac{U_{tn_i} + U_{tn_{i-1}}}{2} \neq U_{tn}^P \quad (\text{フラグ:IUKM1=1})$$

を使うことが考えられる。

フラグ IUKM1=1 の場合には、 d^{PT} と Fig.4.2 a の右隣の面における d^{TQ} において、

$$U_{tn}^{PT} = U_{tn}^{TQ} = \frac{U_{tn_i} + U_{tn_{i-1}}}{2} \text{ (左右または上下で等しい)}$$

となるが、フラグ IUKM1=0 (ν_n を使う) の時には、

$$U_{tn}^P \neq U_{tn}^Q \text{ (左右または上下で異なる)}$$

となる。IUKM1=1 で U_{tn} (n も同じ) は、Fig.4.2 a の 4 分割面の左右または上下で等しくなるが、IUKM1=0 では、左右または上下で異なる値となる。両者 (IUKM1) の違いは、精メッシュの方で顕著に現れる。

(HSE) $_{\beta}$ モデルにおいて、収束は、IUKM1=1の方がガンメル反復がおおむね 2 割減になるので、CPU 時間も 2 割速い。本シミュレーションでは、収束がより速く CPU 時間が 2 割少なくできる、IUKM1=1 により d^{PT} を計算する。IUKM1=1 でも、 d 値は、式中に面で与える μ_n があるために、Fig.4.2 a の左右または上下の面で異なる値になる。また IUKM1=0 では、 R_{umax} 値を 10 % 程度大きくできる。Table 7.1 によれば、メッシュが粗くても精しくても IUKM1=1 は、IUKM1=0 に比べ同じ R_{umax} 値であれば、ドレイン電子電流 Id 値が少し上がるがほぼ同じである。また T_{nmax} もほぼ同じ値になる。IUKM1=0 も IUKM1=1 も、粗いメッシュでは、CPU 時間、 Id 、 T_{nmax} もほとんど変わらないが、精しいメッシュになると、両者で反復回数、したがって CPU 時間に大きく差がでてくる。メッシュが 2 倍精しくなると、両者 (IUKM1) ともゲート長 $Lg = 0.1, 0.2[\mu\text{m}]$ によらず、 Id 値は 15 % 程度下がり、 T_{nmax} 値は 6 % 程度上がる。Table 7.1 等、すべてのシミュレーションは、日立 FLORA HP の dc7900SF Core2 Duo E8600(3.3GHz) 4GB メモリ、Windows XP(Fujitsu FORTRAN V4.0L10) にて行なった。

Table 7.1 Comparison of IUKM1 for (HSE) $_{\beta}$ Model ($Lg = 0.1, 0.2[\mu\text{m}]$)

Lg	n-Mesh	IUKM1	kcount	CPU [s]	Id [mA]	T_{nmax} [K]	R_{umax}
0.1	11118	1	36	6	0.4407	929	0.068
0.1	11118	0	37	6	0.4405	929	0.068
0.1	44457	1	84	22	0.3699	985	0.068
0.1	44457	0	506	92	0.3698	982	0.068
0.2	11118	1	41	5	0.2174	949	0.076
0.2	11118	0	41	5	0.2174	951	0.076
0.2	44457	1	145	29	0.1849	1021	0.076
0.2	44457	0	100	23	0.1849	1021	0.076

IUKM1=1 では、2 段階あみ目法の第 1 段 (SUB1) で行対角優位が崩れ解けないが、Table 7.2 のように、IUKM1=0 (ν_n を使う。 $U_{tn}^P \neq U_{tn}^Q$) ならば、 R_{umax} 値は約 10 % 程度伸びる。その代わりに CPU 時間は増える。 R_{umax} が上がるので、 T_{nmax} は上がり、 Id は少し下がる。例えば、 $Lg = 0.1[\mu\text{m}]$ で IUKM1=1、 $R_{umax}=0.068$ の場合には (Table 7.1)、 $T_{nmax}=985[\text{K}]$ となり、 R_{umax} 値をそれ以上上げると 2 段階あみ目法第 1 段: SUB1 (粗メッシュ) で落ちてしまうが、IUKM1=0 でシミュレーションすると、 $R_{umax}=0.076$ 、 $T_{nmax}=1074[\text{K}]$ まで R_{umax} 値を伸ばせる。 R_{umax} 値が変わり上がっても、 Id はほぼ同じで T_{nmax} は 10 % 程度上がる。そ

のとき、 R_{umax} 値の前後 (0.068 から 0.076) で、 T_{nmax} の位置は変わらない。 $Lg = 0.2[\mu\text{m}]$ でも状況は同じで、 $IUKM1=0$ では R_{umax} 値を 0.076 から 0.082 まで伸ばすことができ、 T_{nmax} も 1021[K] から 1081[K] に上がる。

Table 7.2 Comparison of $IUKM1=0(\nu_n)$ for $(\text{HSE})_\beta$ Model ($Lg = 0.1, 0.2[\mu\text{m}]$)

Lg	n-Mesh	IUKM1	kcount	CPU [s]	Id [mA]	T_{nmax} [K]	R_{umax}
0.1	11118	0	35	5	0.4390	1035	0.076
0.1	44457	0	338	63	0.3690	1074	0.076
0.2	11118	0	41	5	0.2171	1023	0.082
0.2	44457	0	337	62	0.1847	1081	0.082

$(\text{HSE})_\beta$ モデルでは、電子のエネルギーバランス方程式が正常に解ける最大の R_{umax} 値をもって電子温度 T_n のチューニングを行なうが、 $IUKM1=0$ では、 $Lg = 0.1, 0.2[\mu\text{m}]$ とも、 T_{nmax} は 1100[K] 程度の値になる ($IUKM1=1$ では 1000[K] 程度なので +100[K])。まとめると、 $Lg = 0.1, 0.2[\mu\text{m}]$ とも、 $IUKM1=0$ は $IUKM1=1$ に比べ、 R_{umax} 値を 10 % 程度伸ばすことができ、その結果チューニングとして T_{nmax} 値を 10 % 程度上げることができるが、CPU 時間は 2 割程度余計にかかる。したがって、本シミュレーションでは、 $IUKM1=1$ をデフォルトとする。以上、参考のために、 $IUKM1=1$ と 0 における離散化の違いによるシミュレーション比較を行なった (デフォルトは $IUKM1=1$)。

再び、第 i 番方程式 (7.13) に戻り、離散式 (7.5) から (7.12) に対して、

$$1 + \frac{\text{Ber}(z)}{z} = \frac{\text{Ber}(-z)}{z} \quad (z \text{ はセルペクレ数になる}) \quad \text{を使えば、各係数は次式となる。}$$

$$\begin{aligned}
a_{i,i} &= \frac{1}{2} \left[d^{PT} \text{Ber}(\omega^{Py} hy_-) \frac{hx_-}{hy_-} + d^{TQ} \text{Ber}(\omega^{Qy} hy_-) \frac{hx_+}{hy_-} \right] \\
&\quad + \frac{1}{2} \left[d^{PW} \text{Ber}(\omega^{Px} hx_-) \frac{hy_-}{hx_-} + d^{WS} \text{Ber}(\omega^{Sx} hx_-) \frac{hy_+}{hx_-} \right] \\
&\quad + \frac{1}{2} \left[d^{QU} \text{Ber}(-\omega^{Qx} hx_+) \frac{hy_-}{hx_+} + d^{UR} \text{Ber}(-\omega^{Rx} hx_+) \frac{hy_+}{hx_+} \right] \\
&\quad + \frac{1}{2} \left[d^{VR} \text{Ber}(-\omega^{Ry} hy_+) \frac{hx_+}{hy_+} + d^{SV} \text{Ber}(-\omega^{Sy} hy_+) \frac{hx_-}{hy_+} \right] \\
a_{i,i-m} &= -\frac{1}{2} \left[d^{PW} \text{Ber}(-\omega^{Px} hx_-) \frac{hy_-}{hx_-} + d^{WS} \text{Ber}(-\omega^{Sx} hx_-) \frac{hy_+}{hx_-} \right] \\
a_{i,i-1} &= -\frac{1}{2} \left[d^{PT} \text{Ber}(-\omega^{Py} hy_-) \frac{hx_-}{hy_-} + d^{TQ} \text{Ber}(-\omega^{Qy} hy_-) \frac{hx_+}{hy_-} \right] \\
a_{i,i+1} &= -\frac{1}{2} \left[d^{VR} \text{Ber}(\omega^{Ry} hy_+) \frac{hx_+}{hy_+} + d^{SV} \text{Ber}(\omega^{Sy} hy_+) \frac{hx_-}{hy_+} \right] \\
(7.15) \quad a_{i,i+m} &= -\frac{1}{2} \left[d^{QU} \text{Ber}(\omega^{Qx} hx_+) \frac{hy_-}{hx_+} + d^{UR} \text{Ber}(\omega^{Rx} hx_+) \frac{hy_+}{hx_+} \right]
\end{aligned}$$

ここで、

$$\begin{aligned}
\omega^{Py} &= \frac{c_y^{PT}}{d^{PT}}, c_y^{PT} = \frac{5}{2} J_y^{PT}, d^{PT} = \frac{5}{2} \mu_n^P \left(\frac{n_i + n_{i-1}}{2} \right) \cdot U_{tn}^{PT}, U_{tn}^{PT} = \frac{U_{tn_i} + U_{tn_{i-1}}}{2} \\
\omega^{Qy} &= \frac{c_y^{TQ}}{d^{TQ}}, c_y^{TQ} = \frac{5}{2} J_y^{TQ}, d^{TQ} = \frac{5}{2} \mu_n^Q \left(\frac{n_i + n_{i-1}}{2} \right) \cdot U_{tn}^{TQ}, U_{tn}^{TQ} = \frac{U_{tn_i} + U_{tn_{i-1}}}{2} \\
\omega^{Px} &= \frac{c_x^{PW}}{d^{PW}}, c_x^{PW} = \frac{5}{2} J_x^{PW}, d^{PW} = \frac{5}{2} \mu_n^P \left(\frac{n_i + n_{i-m}}{2} \right) \cdot U_{tn}^{PW}, U_{tn}^{PW} = \frac{U_{tn_i} + U_{tn_{i-m}}}{2} \\
\omega^{Sx} &= \frac{c_x^{WS}}{d^{WS}}, c_x^{WS} = \frac{5}{2} J_x^{WS}, d^{WS} = \frac{5}{2} \mu_n^S \left(\frac{n_i + n_{i-m}}{2} \right) \cdot U_{tn}^{WS}, U_{tn}^{WS} = \frac{U_{tn_i} + U_{tn_{i-m}}}{2} \\
\omega^{Qx} &= \frac{c_x^{QU}}{d^{QU}}, c_x^{QU} = \frac{5}{2} J_x^{QU}, d^{QU} = \frac{5}{2} \mu_n^Q \left(\frac{n_{i+m} + n_i}{2} \right) \cdot U_{tn}^{QU}, U_{tn}^{QU} = \frac{U_{tn_{i+m}} + U_{tn_i}}{2} \\
\omega^{Rx} &= \frac{c_x^{UR}}{d^{UR}}, c_x^{UR} = \frac{5}{2} J_x^{UR}, d^{UR} = \frac{5}{2} \mu_n^R \left(\frac{n_{i+m} + n_i}{2} \right) \cdot U_{tn}^{UR}, U_{tn}^{UR} = \frac{U_{tn_{i+m}} + U_{tn_i}}{2} \\
\omega^{Ry} &= \frac{c_y^{VR}}{d^{VR}}, c_y^{VR} = \frac{5}{2} J_y^{VR}, d^{VR} = \frac{5}{2} \mu_n^R \left(\frac{n_{i+1} + n_i}{2} \right) \cdot U_{tn}^{VR}, U_{tn}^{VR} = \frac{U_{tn_{i+1}} + U_{tn_i}}{2} \\
(7.16) \quad \omega^{Sy} &= \frac{c_y^{SV}}{d^{SV}}, c_y^{SV} = \frac{5}{2} J_y^{SV}, d^{SV} = \frac{5}{2} \mu_n^S \left(\frac{n_{i+1} + n_i}{2} \right) \cdot U_{tn}^{SV}, U_{tn}^{SV} = \frac{U_{tn_{i+1}} + U_{tn_i}}{2}
\end{aligned}$$

である。

次に、第 i 番方程式 (7.13) の右辺 f_i の計算についてふれる。CV 法の離散化の元になる積分形の式 (7.3) から、右辺 f_i は、

$$(7.17) \quad f_i = Ru_{max} \cdot \int_{\Omega} \mathbf{J}_n^D \cdot (\nabla \psi^{(k-1)}) - \frac{3}{2} n^{(k-1)} \nu_{\omega n} (U_{tn}^{(k-1)} - U_{T_0}) d\mathbf{v}$$

となる。式 (7.17) は、Fig.4.2 a の CV 法の面 SPQR (積分式では領域 Ω) に対して体積積分を行なう。Fig.4.2 a の節点 i の周りの面 SPQR を 4 分割した：

- (1) 左上面 SWAV (領域 Ω_S : S 面)
- (2) 左下面 WPTA (領域 Ω_P : P 面)
- (3) 右下面 ATQU (領域 Ω_Q : Q 面)
- (4) 右上面 VAUR (領域 Ω_R : R 面)

に対して 4 面の寄与をすべて足して体積積分を行ない、右辺の f_i を作る。

$$(7.18) \quad f_i = Ru_{max} \cdot \int_{\Omega} \mathbf{J}_n^D \cdot (\nabla \psi) - \frac{3}{2} n \nu_{\omega n} (U_{tn} - U_{T_0}) d\mathbf{v} = \int_{\Omega_S} + \int_{\Omega_P} + \int_{\Omega_Q} + \int_{\Omega_R}$$

$$(7.19) \quad \text{ここで、} \nu_{\omega n}(\omega_e) = \nu_{\omega_0} \left(\frac{20\omega_e^8}{1 + 20\omega_e^8} \right) = \nu_{\omega_0} \left(\frac{20(\frac{3}{2}U_{tn})^8}{1 + 20(\frac{3}{2}U_{tn})^8} \right), \quad \omega_e = \frac{3}{2}U_{tn} \quad [\text{eV}]$$

$$\nu_{\omega_0} = \frac{1}{0.4} \quad [\text{ps}^{-1}]$$

式(7.18)を、CV法により Fig.4.2 aに基づき、S面、P面、Q面、R面の総和を書き下すと次式となる。

$$\begin{aligned}
f_i = & Ru_{max} \cdot \left(\left[J_{nx_{i+1}}^D \cdot \left(\frac{\psi_i - \psi_{i-m}}{h_{x-}} \right) + J_{ny_{i+1}}^D \cdot \left(\frac{\psi_{i+1} - \psi_i}{h_{y+}} \right) - \frac{3}{2} n_i \cdot \nu_{\omega n} (U_{tn_i} - U_{T_0}) \right] \cdot \frac{h_{x-} \cdot h_{y+}}{4} \right) \\
& + Ru_{max} \cdot \left(\left[J_{nx_i}^D \cdot \left(\frac{\psi_i - \psi_{i-m}}{h_{x-}} \right) + J_{ny_i}^D \cdot \left(\frac{\psi_i - \psi_{i-1}}{h_{y-}} \right) - \frac{3}{2} n_i \cdot \nu_{\omega n} (U_{tn_i} - U_{T_0}) \right] \cdot \frac{h_{x-} \cdot h_{y-}}{4} \right) \\
& + Ru_{max} \cdot \left(\left[J_{nx_{i+m}}^D \cdot \left(\frac{\psi_{i+m} - \psi_i}{h_{x+}} \right) + J_{ny_{i+m}}^D \cdot \left(\frac{\psi_i - \psi_{i-1}}{h_{y-}} \right) - \frac{3}{2} n_i \cdot \nu_{\omega n} (U_{tn_i} - U_{T_0}) \right] \cdot \frac{h_{x+} \cdot h_{y-}}{4} \right) \\
& + Ru_{max} \cdot \left(\left[J_{nx_{i+m+1}}^D \cdot \left(\frac{\psi_{i+m} - \psi_i}{h_{x+}} \right) + J_{ny_{i+m+1}}^D \cdot \left(\frac{\psi_{i+1} - \psi_i}{h_{y+}} \right) - \frac{3}{2} n_i \cdot \nu_{\omega n} (U_{tn_i} - U_{T_0}) \right] \cdot \frac{h_{x+} \cdot h_{y+}}{4} \right)
\end{aligned} \tag{7.20}$$

Fig.4.2 aにおけるCV領域：面SPQRの体積積分において、 n と U_{tn} の計算は、面SPQR内を一律に節点 i での解析値に代表させるという考えから簡易的に式(7.20)では、

$$n = n_i、と U_{tn} = U_{tn_i}$$

と置いている。また、 $J_n^D \cdot (\nabla \psi)$ については、PT、PWの左辺の線積分の仕方に習って、面Pの \int_{Ω_P} においては、

$$J_n^{DP} = (J_{nx_i}^D, J_{ny_i}^D)$$

$$\begin{aligned}
J_{nx_i}^D &= \mu_{n_i} \cdot \left(\frac{\psi_i - \psi_{i-1}}{h_{y-}} \right) n_{i-1} - Ber(\nu_i \cdot (\psi_i - \psi_{i-1})) \cdot \frac{\mu_{n_i}}{\nu_{n_i}} \left(\frac{n_i - n_{i-1}}{h_{y-}} \right) : PT \\
(7.21) J_{ny_i}^D &= \mu_{n_i} \cdot \left(\frac{\psi_i - \psi_{i-m}}{h_{x-}} \right) n_{i-m} - Ber(\nu_i \cdot (\psi_i - \psi_{i-m})) \cdot \frac{\mu_{n_i}}{\nu_{n_i}} \left(\frac{n_i - n_{i-m}}{h_{x-}} \right) : PW
\end{aligned}$$

$$(7.22) \quad (\nabla \psi)^P = \left(\frac{\psi_i - \psi_{i-m}}{h_{x-}}, \frac{\psi_i - \psi_{i-1}}{h_{y-}} \right)$$

として体積(面)積分した。他も同様に行なう。以上、この第 i 番方程式にしたがう、 $AU=F$ (節点数 N 元)の行列方程式を反復法で解くことになる。

IUKM1フラグに関連して、 U_{tn} の計算についてふれる。面SPQRの体積積分において、面SPQR内を一律に節点 i での解析値に代表させるという考えから簡易的に式(7.20)では、

$$U_{tn} = U_{tn_i}$$

と置いた(IUKM1=1)が、面温度 ν_n を使って計算することもできる(IUKM1=0)。 U_{tn} から換算する ν_n は面で与える値なので、Fig.4.2 aの面S、P、Q、R毎に値が異なる。したがって、式(7.18)の右辺の各4面の面積分をするたびに $U_{tn} = \frac{1}{\nu_n}$ の値が変わる。例えば、 \int_{Ω_P} では、式(7.20)の第2項に変わり次式となる。 U_{tn} と $\nu_{\omega n}$ の所が変わる。 $U_{tn}^P = \frac{1}{\nu_n^P}$ として、

$$Ru_{max} \cdot \left(\left[J_{nx_i}^D \cdot \left(\frac{\psi_i - \psi_{i-m}}{h_{x-}} \right) + J_{ny_i}^D \cdot \left(\frac{\psi_i - \psi_{i-1}}{h_{y-}} \right) - \frac{3}{2} n_i \cdot \nu_{\omega n}^P (U_{tn}^P - U_{T_0}) \right] \cdot \frac{h_{x-} \cdot h_{y-}}{4} \right)$$

$$\text{ここで、} U_{tn}^P = \frac{1}{\nu_n^P}, \nu_n^P \text{ は、面 } P \text{ で一定で、} \nu_n^P = \frac{4}{U_{tn_i} + U_{tn_{i-m}} + U_{tn_{i-m-1}} + U_{tn_{i-1}}}$$

$$(7.23) \text{ エネルギー緩和レート } \nu_{\omega n}^P \text{ は、} \nu_{\omega n}^P = \nu_{\omega 0} \left(\frac{20(\frac{3}{2}U_{tn}^P)^8}{1 + 20(\frac{3}{2}U_{tn}^P)^8} \right), \nu_{\omega 0} = \frac{1}{0.4} \text{ [ps}^{-1}\text{]}$$

両者 (IUKM1) をシミュレーションにより比較した時に、面積分 (7.18) において、 U_{tn} の計算に式 (7.23) のように面温度 ν_n を使うと (IUKM1=0)、Table 7.1 に示した左辺の扱いと連動して CPU 時間が 2 割程度余計にかかることが分かっている。

エネルギーバランス方程式 (7.3) の右辺の、電子温度をチューニングするパラメータ： R_{umax} を上げると解けない理由は (2 段階あみ目法の粗い第 1 段: SUB1 ですでに解けない)、 R_{umax} を上げると、最大電子温度 Tn_{max} の位置近くで、UTNINP (U_{tn} を解く) の収束が悪くなり、その結果である Tn を使う NINPUT (電子密度 n を解く) で解いた n が、その Tn_{max} 付近で $n < 0$ となり、おかしくなる。その $n < 0$ 値を使って計算した、次のガンメルループの UTNINP で、離散係数の対角係数 $a_{i,i}$ (AA) が $a_{i,i} < 0$ ($AA < 0$) となり、まず、ソルバの BCGSTB が解けなくなる。セルペクレ数が発散してしまう。ベルヌーイ関数では、セルペクレ数が決定的である。UTNINP が解けずに、 U_{tn} (電子温度 Tn) < 0 となり、それが次に波及する。その Tn から面温度 ν_n を換算して作り (TN2MEN)、 ν_n を使い電子密度 n を解く時に、NINPUT で $a_{i,i} < 0$ ($AA < 0$) を起こし、NINPUT も解けなくなる。それで、ドレイン電圧 $V_D = 2.0$ [V] で、ゲート電圧 $V_G = 0.0$ から 1.0 [V] に上げて SUB2 の初期値を作るためのステップ：SUB1 でも処理が落ちてしまう (最終的にゲート電圧 V_G は、 2.0 [V] まで上げる)。まず、 U_{tn} を解く UTNINP の離散式 (7.15) の対角優位を、 $a_{i,i} < 0$ ($AA < 0$) により崩し、ソルバ：BCGSTB において正常にガウスが進行しなくなる。

8 デバイスシミュレーション場とモデルパラメータ

実務上、Fig4.1 のシミュレーション場のグラフ上の 1 [cm] (0.1 [μm] に相当) の離散分割数：MJ(y 方向)、MK(x 方向) を、チャンネルのような大事な所は精しく、他の所は粗くして、メモリ数、CPU 時間の節約を図る。ここでのシミュレーションでは、チャンネルの分割数を y 方向：MJ=48 (あみ目刻み $h_y = \frac{1}{MJ}$)、 x 方向：MK=20 (あみ目刻み $h_x = \frac{1}{MK}$) とする (Fig.4.2 a)。全体では、

離散点数 (元数) $N = M1(y \text{ 方向}) \times M2(x \text{ 方向}) = 203 \times 219 = 44457$ 節点となり、この N が CV 法の行列方程式を解く元数となる。Fig.4.1 は、ゲート長 $L_g = 0.2$ [μm] の場合の (HSE) $_{\beta}$ モデル：エネルギー輸送モデルによる電位 ψ 分布を示している。

ソース電極、ドレイン電極にかかる n_- ドーピングの深さは、 y 方向 (バックゲート方向) 0.06 [μm] (60 [nm])、 x 方向 (チャンネル方向) 0.05 [μm] (50 [nm]) とし、Fig.8.1 a の形状のように、Na ドーピング p_+ 基板との境界で濃度が $1.5 \cdot 10^{10}$ [cm^{-3}] になるようにドーピングされているとする。Fig.8.1 a の形状は、Fig.4.1 のドレイン電極側のチャンネル端のドーピングの先端形状を表わし、同心円状のドーピング濃度勾配にする。ドレイン電極上のドーピング濃度は、チャンネル方向 (x 方向) に平行な濃度勾配にするので、Fig.8.1 a のドーピング先端の濃度勾配とは連続的につながる。同様に左側のソース電極上のドーピング濃度も、左

右対称に与える。Ndドーピングのプロファイルは、次式に従うとし、Fig.8.1 b のようになる。

$$(8.1) \quad Nd = n_- \cdot \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{x^2}{\sigma_x^2} + \frac{y^2}{\sigma_y^2}\right)\right)$$

Fig.4.1 では、ゲート長が $0.2[\mu\text{m}]$ になるようにドーピング位置を決めている。ゲート長 L_g が $0.1[\mu\text{m}]$ の場合には、Fig.4.1 においてドーピング開始の位置を内側に $0.05[\mu\text{m}]$ ずらして、ゲート長 $L_g = 0.1[\mu\text{m}]$ とする。

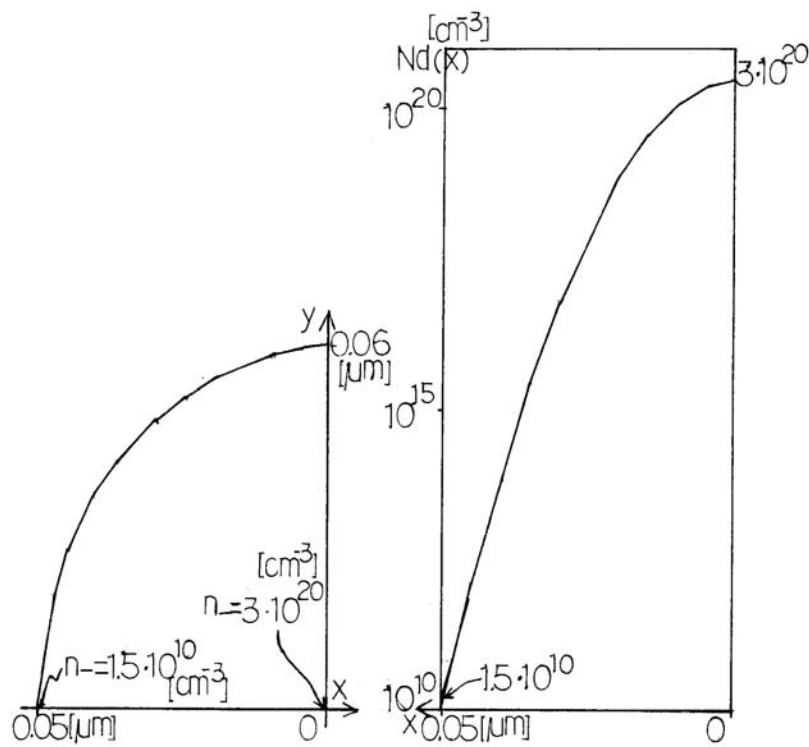


Fig.8.1 a) N_d Doping Shape Fig.8.1 b) N_d Doping Profile

ドーピングは、ゲート長 $L_g = 0.1, 0.2[\mu\text{m}]$ 共通で、

$$t_0(\text{SiO}_2 \text{ 膜厚}) = 6[\text{nm}]$$

$$d_j(\text{ドーピングの深さ}) = 60[\text{nm}]$$

式 (8.1) において、 $\sigma_x = 0.00726$ 、 $\sigma_y = 0.008712$

$$n_- = 3 \cdot 10^{20}[\text{cm}^{-3}] = n_+$$

$$p_+ = 10^{17}[\text{cm}^{-3}]$$

また、チャネル幅 Zw は、

$$Zw = 2[\mu\text{m}]$$

とする。ゲート電圧 $V_G = 2[\text{V}]$ 、ドレイン電圧 $V_D = 2[\text{V}]$ とする。これらのシミュレーション場の設定をまとめると、Table 8.1 になる。

Table 8.1 Simulation Data ($L_g = 0.1, 0.2[\mu\text{m}]$: Same)

L_g	$t_0[\text{nm}]$	$d_j[\text{nm}]$	σ_y	$n_-[\text{cm}^{-3}]$	$p_+[\text{cm}^{-3}]$	$Zw[\mu\text{m}]$	$V_G[\text{V}]$	$V_D[\text{V}]$
0.1	6	60	0.008712	$3 \cdot 10^{20}$	10^{17}	2	2	2
0.2	6	60	0.008712	$3 \cdot 10^{20}$	10^{17}	2	2	2

また、拡張されたドリフト拡散モデル：(HS) $_{\beta}$ (フラグ IET=0 とする) におけるシミュレーションのパラメータ:(γ_F, γ_T) は、ゲート長 $L_g = 0.1, 0.2[\mu\text{m}]$ とともに、

$$\gamma_F = 0.38 (\text{ドレイン電子電流値 } I_d \text{ のチューニング})$$

$$\gamma_T = 0.257 (\text{電子温度 } T_n \text{ のチューニング})$$

とする。一方、エネルギーバランス (輸送) モデル：(HSE) $_{\beta}$ (フラグ IET=1 とする) におけるパラメータ:(γ_F, Ru_{max}) は、

$$\gamma_F = 0.38 (I_d \text{ のチューニング、(HS)}_{\beta} \text{ と共通})$$

$$Ru_{max} (T_n \text{ のチューニングに関係、(HS)}_{\beta} \text{ モデルの } \gamma_T \text{ に相当})$$

となり、

$$L_g = 0.1[\mu\text{m}] \text{ で、 } \gamma_F = 0.38 (\text{同じ}) \quad Ru_{max} = 0.068$$

$$L_g = 0.2[\mu\text{m}] \text{ で、 } \gamma_F = 0.38 (\text{同じ}) \quad Ru_{max} = 0.076$$

とする。各モデルのシミュレーションのパラメータをまとめると、Table 8.2 となる。

Table 8.2 Simulation Parameter ($L_g = 0.1, 0.2[\mu\text{m}]$)

L_g	Model	IET	γ_F	γ_T	Ru_{max}
0.1	(HSE) $_{\beta}$	1	0.38	-	0.068
0.1	(HS) $_{\beta}$	0	0.38	0.257	-
0.2	(HSE) $_{\beta}$	1	0.38	-	0.076
0.2	(HS) $_{\beta}$	0	0.38	0.257	-

9 ドレインアバランシェホットエレクトロン量の評価値 (HCG)

ゲート酸化膜中へアバランシェ注入する電子密度を、ラッキーエレクトロンモデルの考え方に基づき定義し (文献 [1])、それを評価値 HC として使う。さらに評価値 HC は、電流換算して比較に使う。文献 [2] により、電子の平均自由行程 l を $l=0.0078[\mu\text{m}]$ とすれば、電子が距離 d 離れた SiO₂ 界面上まで (Fig.8.2) 到達する確率は、

$$(9.1) \quad A = \exp[-d/l]$$

で与えられる。 $d=0.05, 0.1[\mu\text{m}]$ とすると、 $A=1.6 \times 10^{-3}, 2.7 \times 10^{-6}$ となる。

また、ボルツマン分布によれば、Fig.8.2 の z 点にいる電子が Si-SiO₂ バリア: $\phi_b = 3.2[\text{eV}]$ (文献 [2]) のエネルギーを持つ確率は、

$$(9.2) \quad B = \exp[-\phi_b / (|E_x| \cdot l)] \quad \text{ここで } E_x = \frac{\psi_{i-m} - \psi_i}{h_{x-}}, \psi_i : i \text{ 点での電位}$$

とおける。 $E_x=3.0, 2.0[\times 10^5 \text{ V/cm}]$ とすると、 $B=1.1 \times 10^{-6}, 1.2 \times 10^{-9}$ となる。

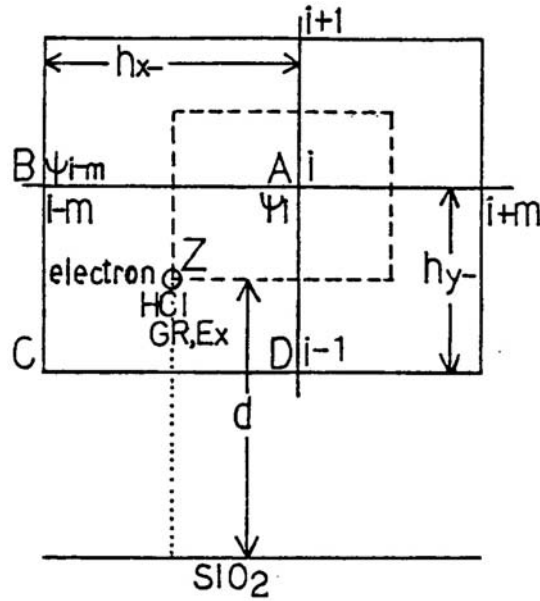


Fig.8.2 lucky electron and mesh

したがって、CV(Control Volume)法により離散化された面 ABCD(Fig.8.2)におけるキャリア生成密度を GR (面内一定で節 2.1 による) とすると、面 ABCD のあみ目領域において、単位面積当たりの評価値 HCI を次のように考えることができる。

$$(9.3) \quad HCI = |GR| \cdot \exp\left[\frac{-\phi_b}{|Ex| \cdot l}\right] \cdot \exp\left[-\frac{d}{l}\right] \quad [\text{cm}^{-3}][\text{sec}^{-1}]$$

たとえば、ドレイン電圧 $V_D=4.5[\text{V}]$ 、ゲート電圧 $V_G=2.5[\text{V}]$ 、バックゲート電圧 $V_{BG}=0.0[\text{V}]$ の時に、 HCI が最大値 (HCI_{max}) となる場所では、

$d=0.02[\mu\text{m}]$, $Ex=3.16[\times 10^5 \text{ V/cm}]$, $GR=1.35 \times 10^{28}[\text{cm}^{-3}]$ で、 $HCI=0.239 \times 10^{22}[\text{cm}^{-3}]$ となる。

さらに、面 ABCD からゲート酸化膜中へアバランシェ注入すると考えられるホットエレクトロン数: $HCI \cdot h_{x-} \cdot h_{y-}$ を、ゲート電流に実際寄与する Fig.4.1 の領域 EFNL(SiO_2 界面からバックゲートに向かって幅 $0.2[\mu\text{m}]$ の領域: x 方向 LXT $\times y$ 方向 $=1.3[\mu\text{m}] \times 0.2[\mu\text{m}]$) で数え上げ、平均をとれば、

$$(9.4) \quad HC = \frac{\Sigma_{EFNL}(HCI \cdot h_{x-} \cdot h_{y-})}{0.2 \cdot \text{LXT}} \quad [\text{cm}^{-3}], \quad \text{LXT は } x \text{ 方向のデバイスサイズ}$$

となる。我々は、この HC 値をドレインアバランシェホットエレクトロンによるゲート電流 I_{gDAHC} に相当する評価値と考えて、高耐压化のための DDD, LDD 構造等を性能評価する際の指標として提案し、それを評価し妥当性を確認している。また、この HC 値は、HC 値に 2 次元シミュレーションゆえに電流計算に必要な n-MOS 場の奥行き $ZW=2[\mu\text{m}]$ と、電荷 $e=1.6022 \times 10^{-19}[\text{C}]$ をかけることにより、実際にゲート電流に対応する計算量 HCG :

$$(9.5) \quad HCG = HC \cdot ZW \cdot 10^{-4} \cdot e \quad (\approx I_{gDAHC}) \quad [\text{A}]$$

として換算できる。この電流換算した HCT 値を、ホットエレクトロン量の評価値として使う。

HCG 値が最小となるドーピング n_- 値は、(式 (9.3) のようには HCG と $E_{x_{max}}$ が直接関係せず) 必ずしも最大 x 方向電場 $E_{x_{max}}$ が最小となる n_- 値と一致しないことが、シミュレーションから分かっている。このため、我々は $E_{x_{max}}$ の大きさや位置が直接にデバイスの性能に関係するわけではなく、性能を見るには、この HCG 値を使うと良く、結論として n_- の最適値は、最小の $E_{x_{max}}$ 値から少し上がった、 HCG 値が最小となる所にあると考えている。DDD(Double Diffused Drain) 構造では、この関係が良く現れるので、LDD(Lightly Doped Drain) 構造のデバイス評価の際には、DDD 構造との定量比較が HCG 値によってできると考える。

10 シミュレーション結果

ゲート長 $L_g = 0.1, 0.2[\mu\text{m}]$ において、

拡張されたドリフト拡散モデル：(HS) $_{\beta}$ と、

エネルギーバランスを組み込んだエネルギー輸送モデル：(HSE) $_{\beta}$

とを比較し、シミュレーションした結果を Table 10.1 に示す。計算は、日立 FLORA HP の dc7900SF Core2 Duo E8600(3.3GHz) 4GB メモリ, Windows XP(Fujitsu FORTRAN V4.0L10) にて行なった。

Table 10.1 Simulation Results ($L_g = 0.1, 0.2[\mu\text{m}]$)

L_g	Model	I_d [mA]	I_{sub} [mA]	$\frac{g_m}{Z_w}$ $V_G=2[\text{V}]$ (max) [$\frac{\text{mS}}{\text{mm}}$]	$T_{n_{max}}$ [K]	V_{th} [V]	CPU Time' (kcount) [s]	μ_n Drain side [$\frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$]	$E_{x_{max}}$ ·10 ⁵ [$\frac{\text{V}}{\text{cm}}$]	HCG ·10 ⁻⁹ [A]
0.1	(HSE) $_{\beta}$	0.3699	0.0211	153 (154)	985	0.718	25'(84)	41	4.973	0.0324
0.1	(HS) $_{\beta}$	0.4257	0.0641	128 (224)	3332	0.778	10'(28)	37	5.186	0.142
0.2	(HSE) $_{\beta}$	0.1849	0.0067	97 (102)	1021	0.880	37'(145)	49	4.371	0.00328
0.2	(HS) $_{\beta}$	0.2161	0.0384	81 (110)	3025	0.851	9'(26)	47	4.697	0.0398

まず、CPU 時間については、ゲート長 $L_g = 0.1, 0.2[\mu\text{m}]$ とともに、最終的なあみ目元数 $N=44457$ の半分のあみ目で初期値を作って、それを 2 倍に補間して最終あみ目の初期値にしてシミュレーションを行なう 2 段階あみ目法で行ない、Fig.10.1 の CPU 時間は両ステップを合算してある。同じ欄の () 内は、精しいあみ目での全体のガンメル反復の回数 (kcount) を示す。2 段階あみ目法では、ガンメル反復の初期値が反復時間短縮の成否を決めており、本シミュレーションでは有効である。電子温度 U_{tn} を解く非対称行列 1 本を余計に反復法ソルバで解くエネルギーバランス (輸送) モデル：(HSE) $_{\beta}$ は、この 1 本の方程式が加わっただけで、拡張されたドリフト拡散モデル：(HS) $_{\beta}$ に比べ、ガンメル反復は約 3 倍増え、それにより CPU 時間も約 3 倍長くなることが分かる。Fig.10.1 において、モビリティ μ_n の測定点は、ドレイン側チャネル端で、Fig.4.1 の 印のある位置である ((HS) $_{\beta}$ モデルで γ_T をチューニングする点と同じ)。

2段階あみ目法において、粗メッシュから精メッシュへの依存性を見ておく (Table 10.2)。

Table 10.2 Dependence of 2-Step Mesh ReZoning Method ($Lg = 0.1, 0.2[\mu\text{m}]$)

Lg	Model	n-Mesh	Id (ratio)	$T_{n_{max}}$ [K]	CPU[s]	kcount
0.1	(HSE) $_{\beta}$	11118	0.4407	929	5	36
0.1	(HSE) $_{\beta}$	44457	0.3699(16.0%)	985	20	84
0.1	(HS) $_{\beta}$	11118	0.4464	3315	3	17
0.1	(HS) $_{\beta}$	44457	0.4257(4.6%)	3332	7	28
0.2	(HSE) $_{\beta}$	11118	0.2174	949	7	41
0.2	(HSE) $_{\beta}$	44457	0.1849(14.9%)	1021	30	145
0.2	(HS) $_{\beta}$	11118	0.2278	2871	3	17
0.2	(HS) $_{\beta}$	44457	0.2161(5.1%)	3025	6	26

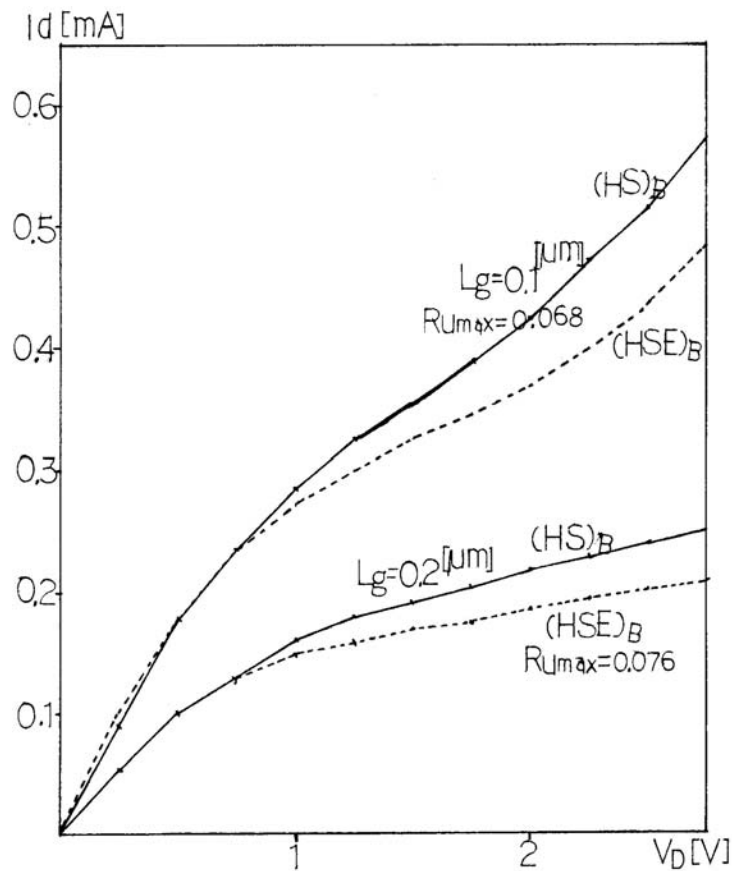


Fig.10.1 Id / V_D Property ($Lg = 0.1, 0.2[\mu\text{m}]$; (HSE) $_{\beta}$, (HS) $_{\beta}$ Model)

ゲート長 $Lg = 0.1, 0.2[\mu\text{m}]$ とともに、第1段は、 $M1(y \text{ 方向}) \times M2(x \text{ 方向}) = 11118$ 元、第2段は、 $M1(y \text{ 方向}) \times M2(x \text{ 方向}) = 44457$ 元として、あみ目を精しくして結果を得る。第1段の結果を2倍に内挿して第2段の初期値に使う。Table 10.2 から、(HSE) $_{\beta}$ の方が、ガンメル反復等にメッシュの精しさの影響を大きく受けることが分かる。

また、あみ目が精しくなれば、 I_d 値は下がり、 $(HSE)_\beta$ モデルでは $(HS)_\beta$ モデルより多く第 2 段目が 15% 程度下がる。最大電子温度 $T_{n_{max}}$ は、あみ目が精しくなれば、上がる。2 段階あみ目法は、初期値が作りにくい $(HSE)_\beta$ モデルでは、特に有効である。

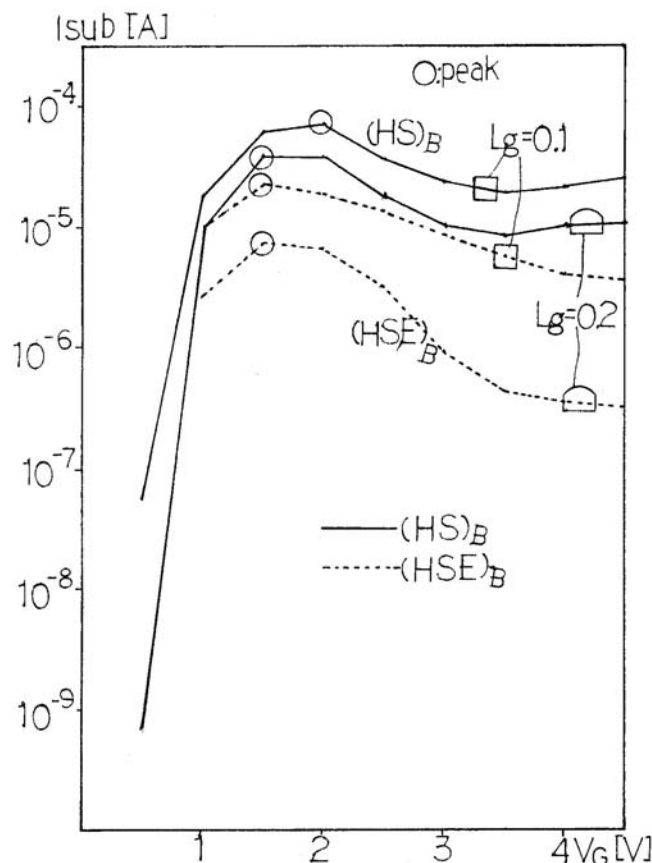


Fig.10.2 I_{sub} / V_G Property ($L_g = 0.1, 0.2[\mu\text{m}]$; $(HSE)_\beta, (HS)_\beta$ Model)

まず、ゲート長を $L_g = 0.1, 0.2[\mu\text{m}]$ と変え、 $(HSE)_\beta$ と、 $(HS)_\beta$ モデルでの、 I_d / V_D 特性を Fig.10.1 に見る。 $(HSE)_\beta$ モデルの方が、 $(HS)_\beta$ モデルに比べ $L_g = 0.1, 0.2[\mu\text{m}]$ とともに、ドレイン電子電流値 I_d は、13% 程度小さい。ゲート長 $L_g = 0.1[\mu\text{m}]$ では、ゲート電圧 V_D による飽和領域が見られない。

基板電流 I_{sub} の I_{sub} / V_G 特性は、Fig.10.2 となる。基板電流 I_{sub} は、 $(HSE)_\beta$ モデルの I_d が小さいのに従って、 I_{sub} も小さい。ゲート長 $L_g = 0.1[\mu\text{m}]$ の方が、 $L_g = 0.2[\mu\text{m}]$ に比べ、 I_{sub} は大きい。

ドレイン側チャネル端でのモビリティ μ_n については、ゲート長 $L_g = 0.1[\mu\text{m}]$ において、 $(HSE)_\beta$ モデルでは $(HS)_\beta$ モデルに比べ I_d 値が減るのに、逆に 10% 程度 μ_n は大きくなる。モビリティ μ_n は、 μ_n 数値モデルにおいて、電子飽和速度 $v_{n_{sat}} = 0.90 \cdot 10^7[\text{cm/s}]$ で飽和させているので、 $(HSE)_\beta$ モデルでも増加は抑えられる。したがって、

$$(10.1) \quad v_d = \mu_n \cdot E \quad (\mu_n \cdot F_n)$$

の計算によるドライビング速度(式(2.5)のドライビングフォース F_n による)は、抑えられ

た値になる。しかし、

$$(10.2) \quad v_d = \frac{Jn_x}{-en}, \quad Jn_x : x \text{ 方向の電子電流、} e : \text{電荷、} n : \text{電子密度}$$

として、ドライビング速度 v_d 値をシミュレーション値から評価すれば、 v_d 値は、 $(HS)_\beta$ モデルの $v_d = \frac{Jn_x}{-en}$ 値より $(HSE)_\beta$ モデルの値の方が速くなっており、電子飽和速度 $v_n^{sat} = 0.90 \cdot 10^7 [\text{cm/s}]$ を超える v_d 値を取ることを示すことができる。これは、速度オーバーシュート現象として知られており、詳しくは後述する。

10.1 相互コンダクタンス $\frac{g_m}{Z_w}$ 特性

相互コンダクタンス g_m について、ゲート長 $Lg = 0.1, 0.2[\mu\text{m}]$ や、 $(HSE)_\beta, (HS)_\beta$ モデルについてシミュレーションにより比較した。ゲート電圧 V_G の $0.1[\text{V}]$ 毎に増分値 ΔId 値を計算し、その V_G 値での相互コンダクタンス g_m :

$$(10.3) \quad g_m = \frac{\Delta Id}{\Delta V_G} \quad \left[\frac{\text{A}}{\text{V}} \right] = [\text{S}] \text{ (ジーメンズ)}$$

を計算する。最終的に相互コンダクタンスの良し悪しは、チャンネル幅を Zw とし、チャンネル面単位長 Zw 当たりの g_m 値 :

$$\frac{g_m}{Zw} \quad \left[\frac{\text{mS}}{\text{mm}} \right]$$

で判断する。 $\frac{g_m}{Zw}$ にすると、ドレイン電子電流 $Id = -e \cdot Zw \cdot J_n^D$ であるので、 Zw がキャンセルして消える利点がある。

チャンネル幅 $Zw = 2.0[\mu\text{m}] = 2 \cdot 10^{-3}[\text{mm}]$ なので、たとえば、
 $(HS)_\beta$ モデルでは、ゲート長 $Lg = 0.2[\mu\text{m}]$ において、
 $V_G = 1.15[\text{V}]$ で、 g_m が最大の $0.2218[\text{mS}]$ になるので、

$$\text{このとき、} \frac{g_m}{Zw} = \frac{0.2218}{2 \cdot 10^{-3}} = 110 \left[\frac{\text{mS}}{\text{mm}} \right] \quad \text{となる。}$$

Fig.10.3 のよれば、各ゲート長 $Lg = 0.1, 0.2[\mu\text{m}]$ 、各 $(HSE)_\beta, (HS)_\beta$ モデルにおいて、 $\frac{g_m}{Zw}$ の最大値は次の結果となる。() 内は最大値を取るときの V_G を示す。

- (1) $Lg = 0.1[\mu\text{m}]$
 $(HSE)_\beta$ $154 \left[\frac{\text{mS}}{\text{mm}} \right]$, ($V_G = 1.6[\text{V}]$)
 $(HS)_\beta$ $224 \left[\frac{\text{mS}}{\text{mm}} \right]$, ($V_G = 1.2[\text{V}]$)
- (2) $Lg = 0.2[\mu\text{m}]$
 $(HSE)_\beta$ $102 \left[\frac{\text{mS}}{\text{mm}} \right]$, ($V_G = 2.7[\text{V}]$)
 $(HS)_\beta$ $110 \left[\frac{\text{mS}}{\text{mm}} \right]$, ($V_G = 1.15[\text{V}]$)

しかし実際には、 V_G は $2[\text{V}]$ で使用するので、相互コンダクタンス g_m の良し悪しは、 $V_G = 2[\text{V}]$ に見るべきであるので、Table 10.3 には、 $V_G = 2[\text{V}]$ の時の $\frac{g_m}{Zw}$ 値を表記している。これによれば、電子温度 U_{tm} のエネルギーバランス方程式を入れたことにより、

(HSE) $_{\beta}$ モデルの $\frac{g_m}{Z_w}$ 値は、(HS) $_{\beta}$ モデルの値に比べゲート長 $L_g = 0.1, 0.2[\mu\text{m}]$ とともに 1.2 倍になっている。また、ホットエレクトロンが顕著な、ゲート長 $L_g = 0.1[\mu\text{m}]$ では、(HSE) $_{\beta}$ モデルにおいて、ゲート長 $L_g = 0.2[\mu\text{m}]$ の同モデルの $\frac{g_m}{Z_w}$ 値に比べ 1.6 倍になり、さらに同ゲート長 $L_g = 0.2[\mu\text{m}]$ のエネルギーバランスを考えない (HS) $_{\beta}$ モデルの $\frac{g_m}{Z_w}$ 値と比べれば 1.9 倍に開く。このことから、エネルギーバランスを組み込んだ (HSE) $_{\beta}$ モデルにおいて、ホットエレクトロンの効果が、定性的には計算できていることが分かる。

Table 10.3 $\frac{g_m}{Z_w}$ Property ($L_g = 0.1, 0.2[\mu\text{m}]$; (HSE) $_{\beta}$, (HS) $_{\beta}$ Model)

L_g	Model	$\frac{g_m}{Z_w}$ (ratio); $V_G = 2[\text{V}]$	$\frac{g_m}{Z_w}$; (Max $V_G[\text{V}]$)	$I_d[\text{mA}]$
0.1	(HSE) $_{\beta}$	153 (1.2)	154 ($V_G=1.6$)	0.3699
0.1	(HS) $_{\beta}$	128 (1.0)	224 ($V_G=1.2$)	0.4257
0.2	(HSE) $_{\beta}$	97 (0.75)	102 ($V_G=2.7$)	0.1849
0.2	(HS) $_{\beta}$	81 (0.63)	110 ($V_G=1.15$)	0.2161

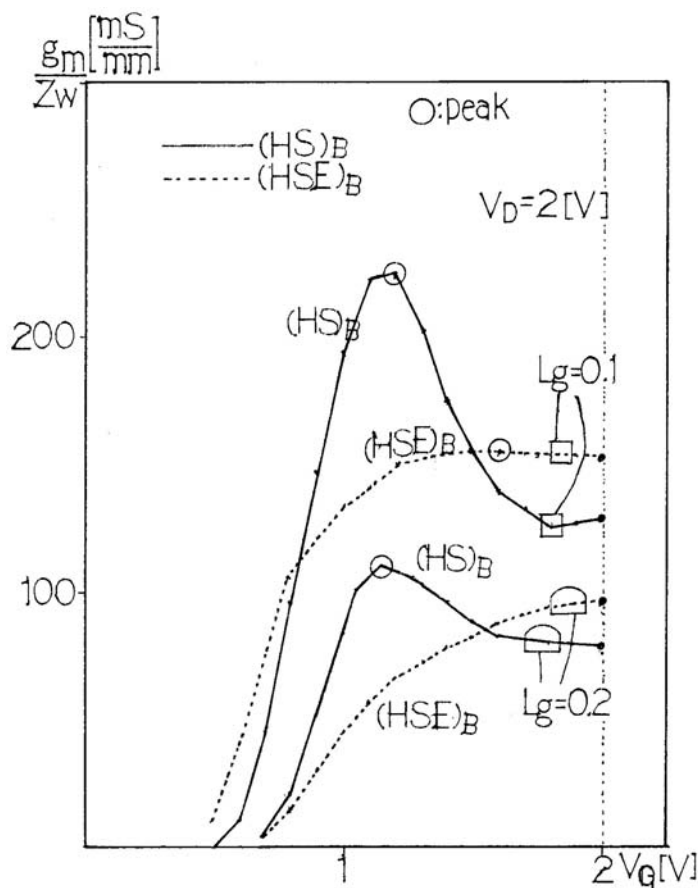


Fig.10.3 g_m / Z_w Property ($L_g = 0.1, 0.2[\mu\text{m}]$; (HSE) $_{\beta}$, (HS) $_{\beta}$ Model)

10.2 ドリフト速度のオーバーシュート現象

1972年に Ruch(文献[3])は、キャリアの過渡的で非平衡な輸送現象として、モンテカルロ法を使って、サブミクロン半導体素子内部の電界が不均一な箇所(チャネル)で、キャリ

ヤ最大ドリフト速度が平衡状態での電界・速度特性値 (電子飽和速度 $v_n^{sat} = 0.90 \cdot 10^7$ [cm/s]) よりも大きくなる現象、すなわちドリフト速度のオーバーシュート現象を示した。この文献の中で、ゲート長が $L_g = 0.1$ [μm] 以下のチャンネル長では、速度オーバーシュートの効果が、キャリア輸送過程に大きな影響を及ぼすことを明らかにした。我々は、この速度オーバーシュートの現象が、ホットエレクトロン効果を組み込んだ半古典的な輸送方程式に基づき、エネルギーバランスを組み込んだ $(\text{HSE})_\beta$ モデルにおいて、どのように現れるかをシミュレーションにより見た。

エネルギーバランスを組み込まない拡張されたドリフト拡散に従う $(\text{HS})_\beta$ モデル、それと比較する $(\text{HSE})_\beta$ モデルとも、電子のモビリティ μ_n の電場依存性数値モデルにおいては、前掲の式 (2.3) のように、電子のドリフト飽和速度 $v_{n,sat}$ を、

$$v_n^{sat} = 0.90 \cdot 10^7 \text{ [cm/s]} \text{ として、}$$

$$(10.4) \quad \mu_n^{LISF} = \frac{2\mu_n^{LIS}}{1 + \sqrt{1 + (2\mu_n^{LIS} \cdot \frac{|F_n|}{v_n^{sat}})^2}} \left[\frac{\text{cm}^2}{\text{V} \cdot \text{s}} \right]$$

として定式化した。式 (10.4) より、

$$\mu_n^{LIS} \geq \frac{v_n^{sat}}{2 |F_n|}$$

のとき、 μ_n^{LIS} にドライビングフォース $|F_n|$ の効果が出てくる。

Table 10.4 Property of driving Velocity Overshoot ($L_g = 0.1, 0.2$ [μm]; $(\text{HSE})_\beta, (\text{HS})_\beta$)

L_g	Model	$\frac{Jn_x}{en} = v_d$ $\cdot 10^5$ [$\frac{\text{cm}}{\text{s}}$]	n $\cdot 10^{14}$ [$\frac{1}{\text{cm}^3}$]	Jn_x $\cdot 10^{-8}$ [A]	μ_n^{LIS} [$\frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$]	$\mu_n^{LISF} \cdot F_n$ ($=v_d^\mu$) $\cdot 10^5$ [$\frac{\text{cm}}{\text{s}}$]	μ_n^{LISF} [$\frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$]	F_n $\cdot 10^5$ [$\frac{\text{V}}{\text{cm}}$]	I_d [mA]
0.1	$(\text{HSE})_\beta$	94.2	0.134	0.202	586	88.4	21.7	4.07	0.3699
0.1	$(\text{HS})_\beta$	70.6	0.176	0.199	472	86.3	37.7	2.29	0.4257
0.2	$(\text{HSE})_\beta$	101	0.060	0.097	712	88.4	24.3	3.64	0.1849
0.2	$(\text{HS})_\beta$	73.0	0.098	0.114	496	85.5	47.8	1.79	0.2161

Table 10.4 は、ドレイン側チャンネル端 (Fig.4.1 の 印) での、シミュレーションで求めたドリフト速度の近似値：

$$\mu_n^{LISF} \cdot F_n \equiv v_d^\mu \quad (F_n \text{ はドライビングフォース})$$

と、チャンネル方向 (x 方向) の電流成分 Jn_x を en で割ったドリフト速度の実効値：

$$\frac{Jn_x}{en} \equiv v_d \quad (e \text{ は電荷、} n \text{ は電子密度})$$

を、ゲート長 $L_g = 0.1, 0.2$ [μm] において、各モデル $(\text{HSE})_\beta$ 、 $(\text{HS})_\beta$ で比較したものである。ドレイン端では、 $Jn \simeq Jn_x$ であるので解析的には、

$$v_d = \mu \cdot F = \frac{Jn}{en} \simeq \frac{Jn_x}{en}$$

という関係がある。Table 10.4 によれば、どのゲート長、どのモデルでもおおよそ、

$$\mu_n^{LISF} \cdot F_n = v_n^\mu \text{ は、} 85 \cdot 10^5 \left[\frac{\text{cm}}{\text{s}} \right] \text{ 程度}$$

であるが、

$$\frac{Jn_x}{en} = v_d \text{ に対しては、} (HS)_\beta \text{ モデルが } 70 \cdot 10^5 \left[\frac{\text{cm}}{\text{s}} \right] \text{ 程度}$$

であるのに対して、電子温度 T_n のバランスを入れた (HSE) $_\beta$ モデルでは、 $Lg = 0.1, 0.2[\mu\text{m}]$ とも、電子の飽和速度 $v_n^{sat} = 90 \cdot 10^5 \left[\frac{\text{cm}}{\text{s}} \right]$ を超えており、

$$Lg = 0.1[\mu\text{m}] \text{ では、} \frac{Jn_x}{en} = 94 \cdot 10^5 \left[\frac{\text{cm}}{\text{s}} \right] \quad : (HSE)_\beta$$

$$Lg = 0.2[\mu\text{m}] \text{ では、} \frac{Jn_x}{en} = 101 \cdot 10^5 \left[\frac{\text{cm}}{\text{s}} \right] \quad : (HSE)_\beta$$

となっている。この

$$\frac{Jn_x}{en} = v_d$$

に対して、 $Lg=0.1$ (Fig.10.4), 0.2 (Fig.10.5) $[\mu\text{m}]$ とも、チャンネルに沿ってシミュレーションした値をプロットしたものが、Fig.10.4、Fig.10.5 である。Fig.10.4($Lg=0.1$)、Fig.10.5($Lg=0.2$) とも、左側がソース電極端、右側がドレイン電極端で SiO_2 界面チャンネル上の、シミュレーションによる $\frac{Jn_x}{en} = v_d$ の計算値をプロットしてある。グラフの下に、グラフ横軸 (チャンネル x 方向) の位置関係が分かるように、対応する構造図 (Fig.4.1 参照) が書いてある。各ゲート長とも、Fig.10.4、Fig.10.5 によれば、(HSE) $_\beta$ モデルでは、(HS) $_\beta$ モデルに比べ、ドレイン端で実効的なドリフト速度： $\frac{Jn_x}{en}$ がより立ち上がることが分かる。図では、実線が (HS) $_\beta$ モデルで、破線が (HSE) $_\beta$ モデルの結果を示し、(HSE) $_\beta$ モデルの計算値は、飽和速度 $v_n^{sat} = 90 \cdot 10^5 \left[\frac{\text{cm}}{\text{s}} \right]$ を超えている。この結果は、エネルギーバランスを入れた (HSE) $_\beta$ モデルでは、ドリフト速度の速度オーバーシュート現象を反映した結果を示し、現象を表わすことができていると考える。

$$\mu_n^{LISF} \cdot F_n \equiv v_n^\mu$$

は、式 (2.3) のように、 μ_n^{LISF} を飽和速度 v_n^{sat} で飽和するようにモデル化してあるので、 $\mu_n^{LISF} \cdot F_n$ が v_n^{sat} を超えることはない。このとき、 $Lg=0.1[\mu\text{m}]$ の方が、 $Lg=0.2[\mu\text{m}]$ に比べ、 F_n が大きくなるので、飽和の効果から逆に μ_n は小さくなる。(HSE) $_\beta$ モデルの方が、(HS) $_\beta$ モデルに比べ、 μ_n^{LISF} は小さく、 F_n は大きくなる。

(HSE) $_\beta$ モデルにおいて、

$$\frac{Jn_x}{en} \equiv v_d$$

が、飽和速度 v_n^{sat} を超える時、ピンチオフの場所の電子密度 n が減るのでドリフト速度 v_d が大きくなる。

また、 v_n^{sat} で飽和するように電場依存性を入れた最終の μ_n^{LISF} モデル (式 (2.3)) の値を計算する時に使う、前の表面散乱効果だけを考慮したモデル (式 (2.6))： μ_n^{LIS} の値は、Table 10.4 のようになっている、

$$Lg = 0.1[\mu\text{m}] \text{ では (HSE)}_\beta \text{ モデルにおいて、} \mu_n^{LIS} = 586 \left[\frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}} \right]$$

となる。一方、

$$Lg = 0.2[\mu\text{m}] \text{ では } (\text{HSE})_{\beta} \text{ モデルにおいて、} \mu_n^{\text{LIS}} = 712 \left[\frac{\text{cm}^2}{\text{V}\cdot\text{s}} \right]$$

となる。この μ_n^{LIS} 値は、飽和速度 v_n^{sat} のしぼりをかける前なので、 $(\text{HSE})_{\beta}$ モデルの μ_n^{LIS} 値は、 $(\text{HS})_{\beta}$ モデルに比べ、大きい値を取る。一方、式 (2.3) のように電場依存をかけると、 μ_n^{LISF} 値は、より飽和の効果を受けるので逆転して $(\text{HSE})_{\beta}$ モデルの方が、小さい値を取る。

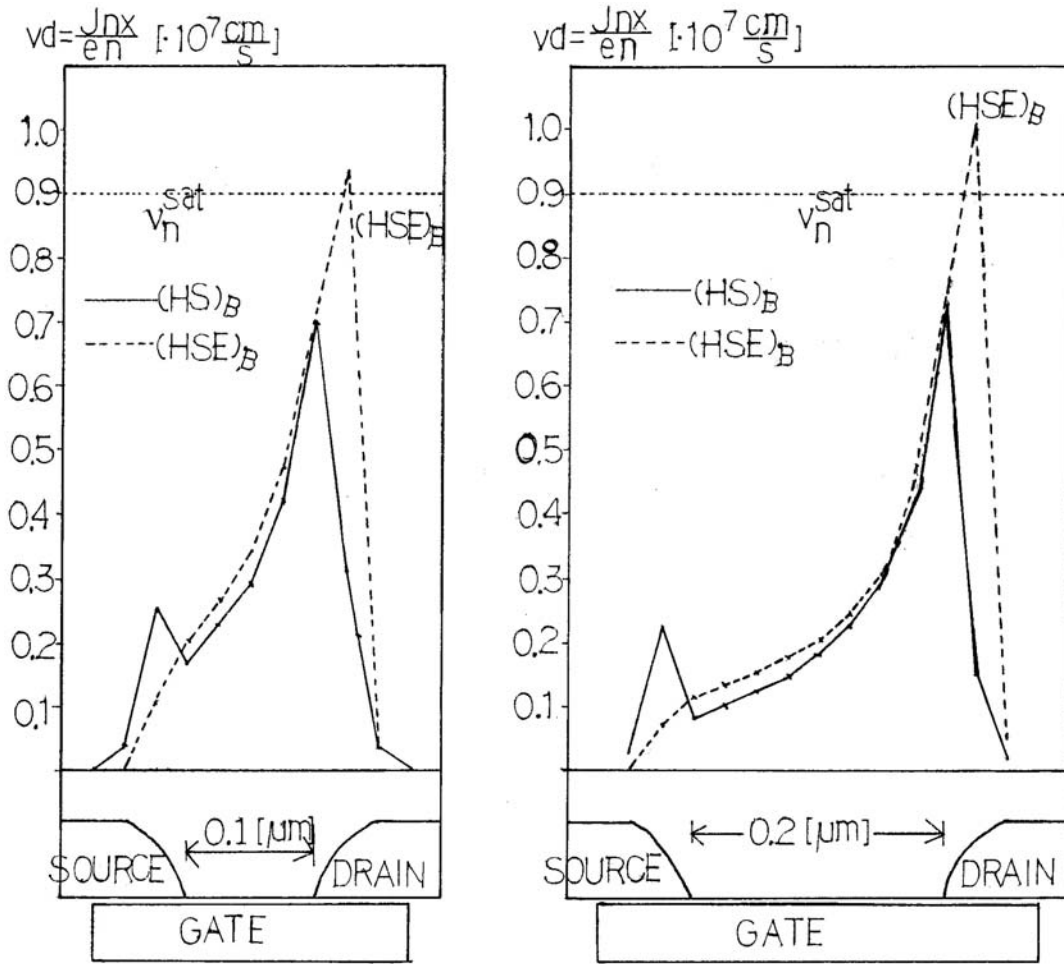


Fig.10.4 $\frac{J_{nx}}{en} = v_d$ Property ($Lg = 0.1$) Fig.10.5 $\frac{J_{nx}}{en} = v_d$ Property ($Lg = 0.2$)

10.3 T_n のチューニングパラメータ Ru と最大電子温度 $T_{n_{max}}$; $(\text{HSE})_{\beta}$

拡張されたドリフト拡散モデル: $(\text{HS})_{\beta}$ では、モビリティと関係付けた式 (2.8) による計算式によって電子温度 T_n を求めた。その時、 T_n のチューニングパラメータ γ_T は、チャンネルのドレイン端 (Fig.4.1 の印) で、シミュレーションによるラッキーエレクトロンの T_n が、

$$(10.5) \quad k_B T_n = e E x \cdot l ; \quad l \text{ は電子の平均自由行程 } (l = 0.0078[\mu\text{m}])$$

となるように、 γ_T を決めることにした (式 (2.10) と同じ)。この基準にしたがい、ゲート長 $L_g = 0.2[\mu\text{m}]$ においてチューニングすると、 $\gamma_T = 0.257$ となる (Fig.2.1)。ゲート長 $L_g = 0.1[\mu\text{m}]$ においても、同じ γ_T 値を使った。

一方、エネルギーバランスを方程式に基づき電子温度 U_{tn} を解く $(\text{HSE})_\beta$ モデルにおいては、方程式 (7.3) の右辺に $U_{tn}(= \frac{k_B}{e} T_n)$ のチューニングパラメータとしての乗数: Ru_{max} を導入した。離散化係数が対角優位になり、正常にガウスの計算が進行する最大の値: Ru_{max} を T_n のチューニング値として決める。最大の Ru_{max} 値を超えると離散化係数の対角係数 $a_{i,i} = AA$ が負 ($AA < 0$) になり、サブルーチン UTNINP で解いたドレイン付近の電子温度 U_{tn} が負 ($U_{tn} < 0$) になり、正常に UTNINP が解けなくなる。

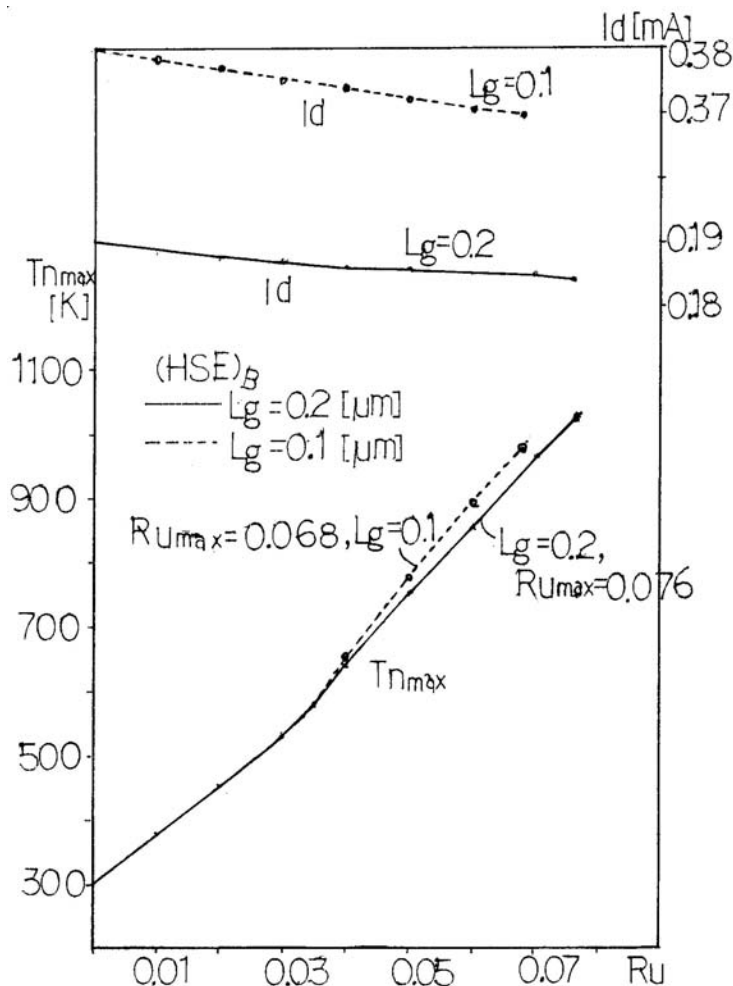


Fig.10.6 $T_{n_{max}}$ Property for Ru parameter ($L_g = 0.1, 0.2[\mu\text{m}]$; $(\text{HSE})_\beta$ Model)

Fig.10.6 では、方程式 (7.3) の右辺の乗数: Ru を変えた時の最大電子温度 $T_{n_{max}}$ の推移を表わしてある。 $(\text{HSE})_\beta$ モデルにおける電子温度 U_{tn} のチューニングパラメータ: Ru を上げるとほぼ線形に最大電子温度 $T_{n_{max}}$ も連動して上がる。ゲート長 $L_g = 0.1[\mu\text{m}]$ においても、 $L_g = 0.2$ においても、ほぼ同じ直線になる (Fig.10.6)。この Ru の変化 (0.0 から 0.07) の中で、ドレイン電子電流値 Id は、2%程度しか変わらない。ゲート長によらず、チューニングパラメータ Ru は、最大電子温度 $T_{n_{max}}$ を上げるだけであることが分かる。元の方

程式の積分形は、式 (5.2) :

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

であり、左辺の表面 Γ からの流出量は、右辺の表面 Γ 内の領域 Ω からの発生量に等しいという連続の式になっている。右辺の発生量に、乗数 Ru を掛けて、電子温度 Tn_{max} のチューニングパラメータとしていることになる。

10.4 Tn と E_x の分布とホットエレクトロン量の評価値 HCG

モデルの違いによる、シミュレーション結果 (物理量) の特徴を見るために、Table 10.1 の結果から、必要な部分だけ抜き出したものが、Table 10.5 である。

Table 10.5 Simulation Results ($Lg = 0.1, 0.2[\mu\text{m}]$; $(\text{HSE})_{\beta}, (\text{HS})_{\beta}$ Model)

Lg	Model	γ_T	Ru_{max}	I_d [mA]	Tn_{max} [K]	HCG $\cdot 10^{-9}[\text{A}]$	$E_{x_{max}}$ $\cdot 10^5[\frac{\text{V}}{\text{cm}}]$	$\frac{Jn_x}{en} = v_d$ $\cdot 10^5[\frac{\text{cm}}{\text{s}}]$
0.1	$(\text{HSE})_{\beta}$	-	0.068	0.3699	985	0.0324	4.973	94.2
0.1	$(\text{HS})_{\beta}$	0.257	-	0.4257	3332	0.142	5.186	70.6
0.2	$(\text{HSE})_{\beta}$	-	0.076	0.1849	1021	0.00328	4.371	101
0.2	$(\text{HS})_{\beta}$	0.257	-	0.2161	3025	0.0398	4.697	73.0

ゲート長が $Lg = 0.1, 0.2[\mu\text{m}]$ とともに、 $(\text{HSE})_{\beta}$ モデルと $(\text{HS})_{\beta}$ モデルにおけるドレイン電子電流 I_d 値の差が 10 % 程度であるのに比べ、最大電子温度 Tn_{max} 値の差は、 $(\text{HSE})_{\beta}$ モデルでは、 $(\text{HS})_{\beta}$ モデルの値に比べ $\frac{1}{3}$ になる。実際に、ゲート長が $Lg = 0.1, 0.2[\mu\text{m}]$ とともに、ゲート電圧 $V_D = 2[\text{V}]$ 、ドレイン電圧 $V_D = 2[\text{V}]$ において、 $(\text{HS})_{\beta}$ モデルでは、 Tn_{max} がおよそ 3000[K] となる。1[eV] $\simeq 10^4[\text{K}]$ であるので、3000[K] は 0.3[eV] に相当し、少し高い電子温度 [eV] であるように思われる。エネルギーバランスを方程式から解く $(\text{HSE})_{\beta}$ モデルの Tn_{max} 値が、簡易的に Tn を計算してしまう $(\text{HS})_{\beta}$ モデルの $\frac{1}{3}$ の値になることによって、ホットエレクトロン量を見積もった評価値 HCG も、各ゲート長とも $(\text{HSE})_{\beta}$ モデルの HCG 値は、 $(\text{HS})_{\beta}$ モデルのほぼ $\frac{1}{10}$ に下がる。 $(\text{HSE})_{\beta}$ モデルでは、 Tn_{max} 値が下がるので、ホットエレクトロン量の評価値 HCG も下がる。それは適正だと考える。

ドレイン側の SiO_2 界面近くに現れる、最大 x 方向電場 $E_{x_{max}}$ も、 $(\text{HSE})_{\beta}$ モデルでは、 $(\text{HS})_{\beta}$ モデルに比べ 10 % 近く下がるが、実効的な速度オーバーシュート現象を示す、電子の飽和速度 v_n^{sat} を超える $\frac{Jn_x}{en} = v_d$ 値は現れる。ドレイン側の SiO_2 界面近くに現れる最大 x 方向電場 $E_{x_{max}}$ は、ドレインアバランシェホットエレクトロンを作る。 $(\text{HSE})_{\beta}$ モデルでは、 $E_{x_{max}}$ 値が下がるので、評価値 HCG も下がる。

Fig.10.7 にはゲート長が $Lg = 0.1[\mu\text{m}]$ の、Fig.10.8 にはゲート長が $Lg = 0.2[\mu\text{m}]$ の、それぞれ左側に $(\text{HSE})_{\beta}$ モデルの、右側に $(\text{HS})_{\beta}$ モデルにおける、チャンネル周りの電位 ψ 分布、 x 方向電場 E_x 分布、電子温度 Tn 分布、電子のモビリティ μ_n^{LISF} 分布を等高線表示で表わしてある。

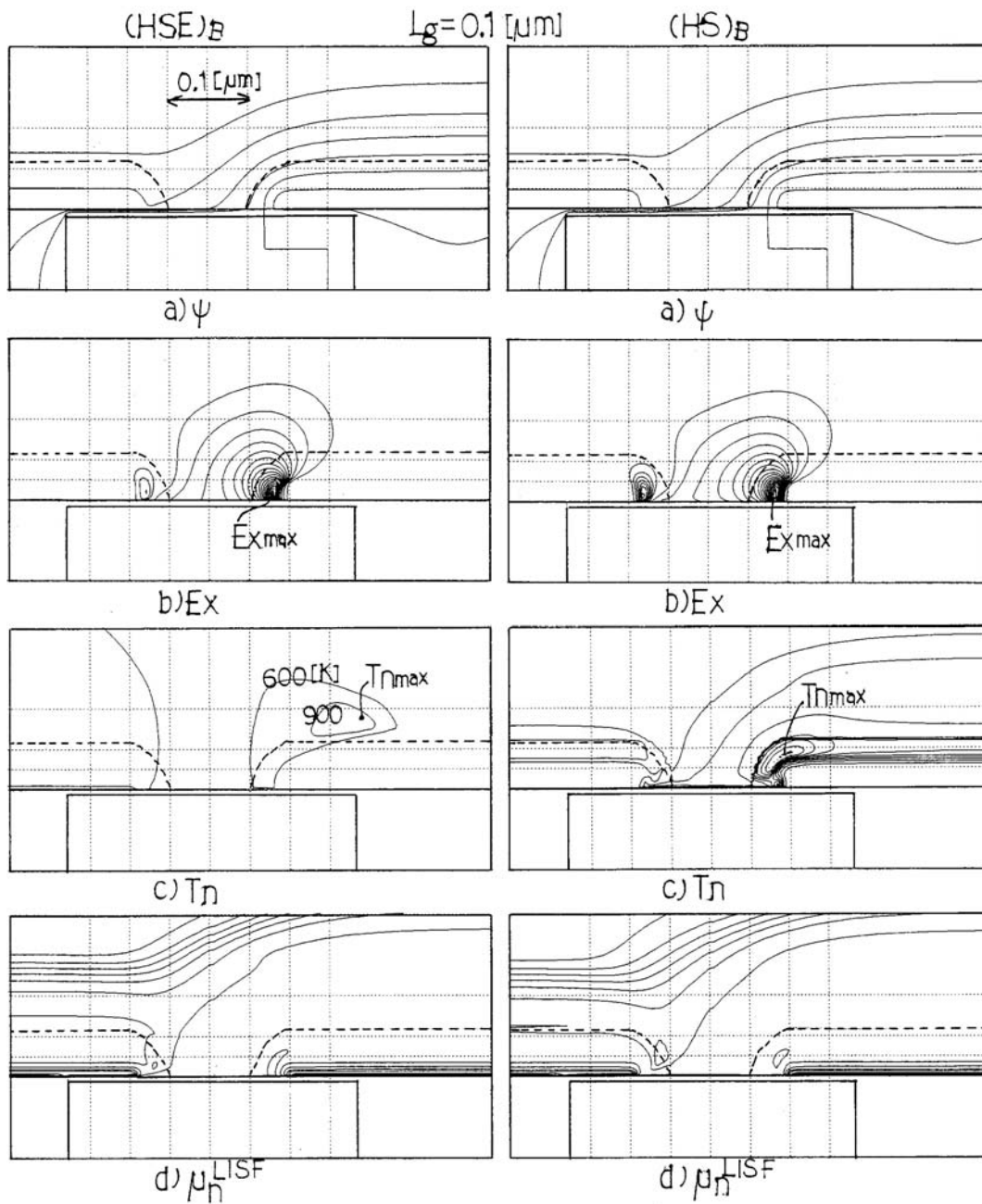


Fig.10.7 ψ , E_x , T_n , μ_n^{LISF} Distribution ($L_g = 0.1[\mu\text{m}]$; $(\text{HSE})_\beta, (\text{HS})_\beta$ Model)

Fig.10.7, Fig.10.8のように、ゲート長 $L_g = 0.1, 0.2[\mu\text{m}]$ とも、 $(\text{HSE})_\beta$ 、 $(\text{HS})_\beta$ モデルによらず、最大 x 方向電場 $E_{x_{max}}$ の位置は、ドレイン側のチャネル端ピンチオフ側の N_d ドープ拡散層内の SiO_2 界面少し上の、同様の位置になる。ホットエレクトロンを少なくするためには、 N_d ドープ拡散の濃度を段階的に変え LDD 等の方法により、 $E_{x_{max}}$ の位置を SiO_2 界面上から離れた位置にすることが求められる。

$(\text{HS})_\beta$ モデルにおいて、ゲート長 $L_g = 0.1, 0.2[\mu\text{m}]$ とも、最大電子温度 $T_{n_{max}}$ の位置は、 N_d ドープ拡散層内で、 $E_{x_{max}}$ 位置の上 (バックゲート方向) になる。この $T_{n_{max}}$ の位置は、値も違うが $(\text{HSE})_\beta$ モデルにおいては、 $(\text{HS})_\beta$ モデルとは大きく違う。同じ $(\text{HSE})_\beta$ モデル

であれば、ゲート長 $L_g = 0.1, 0.2[\mu\text{m}]$ の挙動を見ると、同様になっている。(HSE) $_{\beta}$ モデルの $T_{n_{max}}$ は、ドレイン側 N_d 拡散層の外側で、チャンネルとはかなり離れた位置になる。
 (HSE) $_{\beta}$ モデルにおける T_n のチューニングパラメータ R_u を、 $R_{u_{max}}$ まで徐々に上げていくと、 $T_{n_{max}}$ の位置は、ドレイン側チャンネル左上から右上へ N_d ドープの外側境界に沿って移動していく。

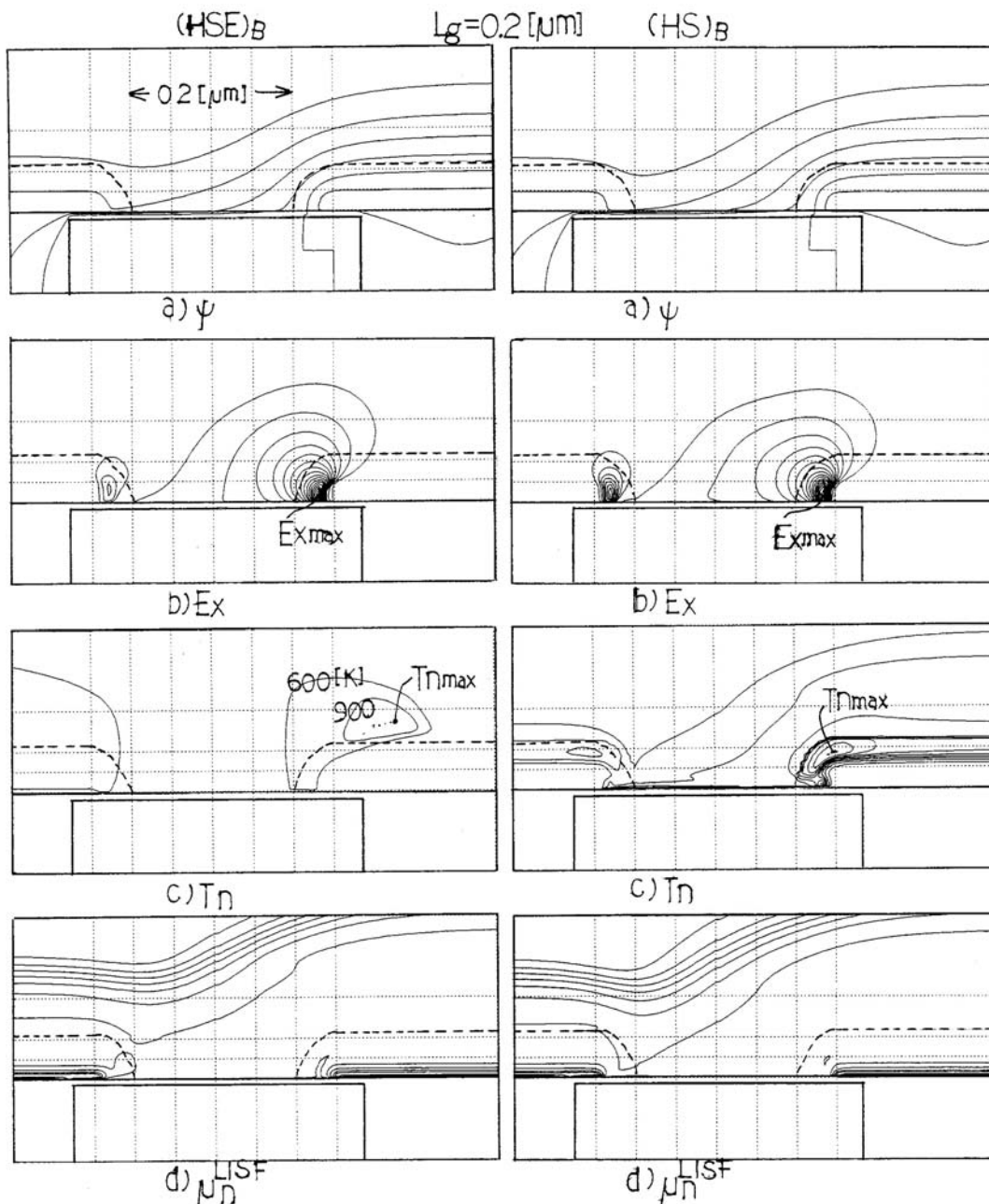


Fig.10.8 $\psi, E_x, T_n, \mu_n^{LISF}$ Distribution ($L_g = 0.2[\mu\text{m}]$; (HSE) $_{\beta}$, (HS) $_{\beta}$ Model)

(HS) $_{\beta}$ モデルのシミュレーションでは、 $E_{x_{max}}$ によってホット電子が加速され、式(2.8)の計算式から $T_{n_{max}}$ を作り、したがって、 $T_{n_{max}}$ は $E_{x_{max}}$ の近くに現れる。

一方、エネルギーバランスにしたがって T_n を正確に解く (HSE) $_{\beta}$ モデルのシミュレーションでは、 E_x の傾斜によってホットエレクトロンが加速され、 $T_{n_{max}}$ を作っているように見える。 E_x を減らすと、ドーピング n -側が高耐圧化し、ホットキャリアの発生を抑制する大きな効果があることが分かっている。Table 10.5 によれば、ゲート長が $L_g = 0.1[\mu\text{m}]$ の方が、 $L_g = 0.2[\mu\text{m}]$ より、 $E_{x_{max}}$ が高い。同じゲート長ならば、(HSE) $_{\beta}$ モデルの方が (HS) $_{\beta}$ モデルより、 $E_{x_{max}}$ が低い値を取る。

$T_{n_{max}}$ の位置について考察する。(HS) $_{\beta}$ モデルでは、ドライブングフォース F_n を通して電場依存性をモデル化したモビリティ: μ_n^{LISF} を使って、電子温度 $U_{t_n} = \frac{k_B}{e} T_n$ を式 (2.8) により計算する。この計算式は、 μ_n^{LISF} を U_{t_n} で表わしたモデルを、逆に解いた形で定式化されている。式を再掲する。

$$\mu_n^{LISF} = \frac{2\mu_n^{LIS}}{1 + \sqrt{1 + (2\mu_n^{LIS} \cdot |\mathbf{F}_n| / v_n^{sat})^2}} \left[\frac{\text{cm}^2}{\text{V} \cdot \text{s}} \right] \quad v_n^{sat} = 0.90 \cdot 10^7 \text{ [cm/s]}$$

$$|\mathbf{F}_n| = \left| \nabla\psi - \frac{\gamma_F}{n} \nabla(n \cdot U_{t_n}) \right|, \quad U_{t_n} = U_{T_0} \left[1 + \gamma'_T \left(\frac{\mu_n^{LIS}}{\mu_n^{LISF}} - 1 \right) \right] = \frac{1}{\nu_n} = \frac{k_B}{e} T_n$$

したがって、(HS) $_{\beta}$ モデルでは、電子温度 T_n を、

$$T_n = T_n(\mu_n^{LISF}(F_n(E))), \quad E = |\nabla\psi|$$

とモデル化しているので、(HS) $_{\beta}$ モデルにおいて、等高線の $E_{x_{max}}$ の位置の近くに $T_{n_{max}}$ の位置が来るのは理にかなう。

一方、(HSE) $_{\beta}$ モデルでは、電子キャリア密度のバランス方程式である電流連続の方程式:

$$(10.6) \quad \text{div} \left[\frac{\mathbf{J}_n}{-e} \right] = \text{div}[-D_n \nabla n + (\mu_n \nabla\psi)n] = GR$$

にしたがって電子エネルギーが流れる、エネルギーバランスの方程式を正確に解き電子温度 $U_{t_n} = \frac{k_B}{e} T_n$ を求め、 $T_{n_{max}}$ を得る。キャリアの平均エネルギーが主に熱によるとした、電子のエネルギーバランス方程式 (3.1) を再掲する。

$$(10.7) \quad \text{div}[\mathbf{s}] = \text{div}[n \mathbf{v}_d \omega + \mathbf{v}_d n k_B T_n + n \mathbf{q}] = e(\nabla\psi) \cdot \mathbf{v}_d n - n \nu_{\omega}(\omega)(\omega - \omega_0)$$

ここで \mathbf{s} :エネルギー流量、電子の平均エネルギー: $\omega = \frac{3}{2}e U_{t_n}$ 、 $\omega_0 = \frac{3}{2}e U_{T_0}$ 、

$\mathbf{v}_d = \frac{\mathbf{J}_n}{en}$:ドリフト速度、 $n \mathbf{q} = -\kappa \nabla T_n$:熱流量、 κ :熱伝導率、

$\nu_{\omega}(\omega)$:エネルギー緩和レート

電子電流 \mathbf{J}_n を通して電子エネルギー ω が運ばれ、 $\text{div}[\nabla\psi] = \text{div}[-E]$ にしたがってエネルギーが流れ、そのバランスによって最大電子温度 $T_{n_{max}}$ が決まるので、

$$T_n = T_n(\omega \cdot \mathbf{J}_n(\text{div}[\nabla\psi])) = T_n(\omega \cdot \mathbf{J}_n(\nabla E_x))$$

ということになり、(HSE) $_{\beta}$ モデルにおいて、Fig.10.7、Fig.10.8 の x 方向電場 E_x の等高線の ∇E_x 方向に沿って $T_{n_{max}}$ の位置があるのは理にかなう。

Fig.10.7、Fig.10.8 d)には、各ゲート長、各モデルにおけるモビリティ μ_n^{LISF} のシミュレーション結果の等高線も示されている。 μ_n^{LISF} については、各モデルにおいて共通のモデル計算式(2.3)を使って比較をしているので、大きな差はない。

10.5 しきい値電圧 V_{th} 特性(サブスレッショルド特性)

最後に、書くゲート長 $L_g = 0.1, 0.2[\mu\text{m}]$ における、 $(\text{HSE})_\beta$ モデルと $(\text{HS})_\beta$ モデルでのしきい値 V_{th} 値の違いを見る。LDD構造では、しきい値 V_{th} を上げる効果が期待できることが分かっている。

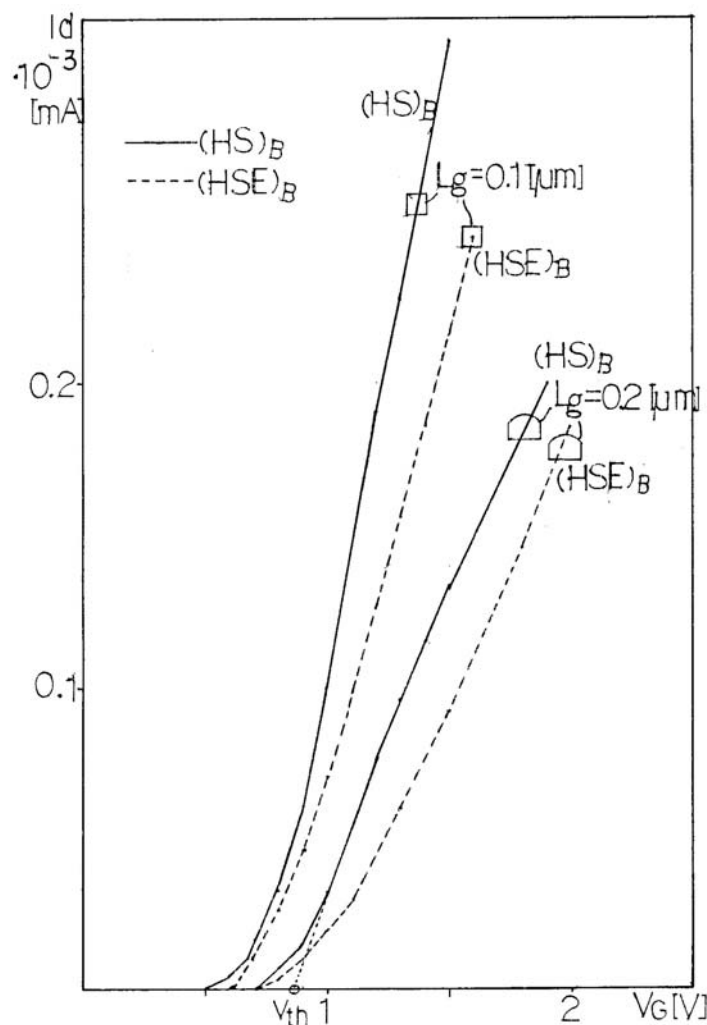


Fig.10.9 $V_G - I_d$ Property ($L_g = 0.1, 0.2[\mu\text{m}]$; $(\text{HSE})_\beta, (\text{HS})_\beta$ Model)

しきい値 V_{th} は、ドレイン電子電流 I_d 値が、 $0.02 \sim 0.08[\text{mA}]$ 当たりの $V_G - I_d$ グラフの接線を取り、 $I_d=0.0$ との V_G 軸の交点を V_{th} とした。その結果、 V_{th} 付近のサブスレッショルド領域では、 $V_G - I_d$ グラフの傾きは、 $(\text{HSE})_\beta$ モデルの方が小さくなっていく。 V_{th} の値もほぼ変わらないが、おおむね $(\text{HSE})_\beta$ モデルの方が小さくなる。 $V_G - I_d$ グラフは、Fig.10.9に示し、グラフから求めた V_{th} 値は、Table 10.6にまとめた。

Table 10.6 V_{th} Property ($Lg = 0.1, 0.2[\mu\text{m}]$; $(\text{HSE})_\beta, (\text{HS})_\beta$ Model)

Lg	Model	$V_{th}[\text{V}]$	$I_d[\text{mA}]$
0.1	$(\text{HSE})_\beta$	0.718 (8 %)	0.3699
0.1	$(\text{HS})_\beta$	0.778	0.4257
0.2	$(\text{HSE})_\beta$	0.880 (3 %)	0.1849
0.2	$(\text{HS})_\beta$	0.851	0.2161

11 おわりに

かくして、微分系表記で、エネルギーバランスを組み込んだエネルギー輸送 (バランス) モデル: $(\text{HSE})_\beta$ は、

[1] 電位 ψ のポアソン方程式 (1.1) <対称行列> :

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

[2] 電子 n の移流拡散 (連続) 方程式 (1.2) <非対称行列> :

$$\text{div}[-D_n \nabla n + (\mu_n \nabla \psi) n] = GR, \quad \text{div} \begin{bmatrix} \mathbf{J}_n \\ -e \end{bmatrix} = GR, \quad \left| \frac{(\mu_n \nabla \psi) h_x}{D_n} \right|, \left| \frac{(\mu_n \nabla \psi) h_y}{D_n} \right|: \text{セルペクレ数}$$

[3] 正孔 p の移流拡散 (連続) 方程式 (1.3) <非対称行列> :

$$\text{div}[-D_p \nabla p - (\mu_p \nabla \psi) p] = GR, \quad \text{div} \begin{bmatrix} \mathbf{J}_p \\ e \end{bmatrix} = GR, \quad \left| \frac{(\mu_p \nabla \psi) h_x}{D_p} \right|, \left| \frac{(\mu_p \nabla \psi) h_y}{D_p} \right|: \text{セルペクレ数}$$

[4] 電子温度 U_{tn} のエネルギーバランス方程式 (7.1) <非対称行列> :

$$\text{div} \left[-\frac{5}{2} n \mu_n U_{tn} \nabla U_{tn} + \frac{5}{2} \mathbf{J}_n^D U_{tn} \right] = \mathbf{J}_n^D \cdot (\nabla \psi) - \frac{3}{2} n \nu_{\omega n} (U_{tn} - U_{T_0}), \quad \mathbf{J}_n^D = \frac{\mathbf{J}_n}{-e},$$

$$\left| \frac{2.5 J_{nx}^D h_x}{2.5 n \mu_n U_{tn}} \right|, \left| \frac{2.5 J_{ny}^D h_y}{2.5 n \mu_n U_{tn}} \right|: \text{セルペクレ数}$$

の4式から、電位 ψ 、電子、正孔密度 n, p 、電子温度 U_{tn} を解く。

一方、拡張されたドリフト拡散方程式モデル: $(\text{HS})_\beta$ は、 $(\text{HSE})_\beta$ モデル第4式の電子のエネルギーバランス方程式を解くのを省略して、電子温度 U_{tn} を計算モデル (2.8) :

[4'] 電子温度 U_{tn} のエネルギーバランス方程式 (7.1) の代わり :

$$U_{tn} = U_{T_0} \left[1 + \gamma'_T \left(\frac{\mu_n^{LIS}}{\mu_n^{LISF}} - 1 \right) \right] = \frac{1}{\nu_n} = \frac{k_B}{e} T_n, \quad U_{T_0} \equiv \frac{1}{38.68} = \frac{1}{\nu_0}$$

で与えてしまう。

両モデルで共通とした、モビリティ μ_n は、本来は電子の運動量 p におけるバランス方程式を解く必要があるが、エネルギー輸送モデルとして省略して、次の μ_n モデル式 (2.3) により計算している。

[5] モビリティ μ_n の計算モデル (両モデル共通) :

$$\mu_n^{LISF} = \frac{2\mu_n^{LIS}}{1 + \sqrt{1 + (2\mu_n^{LIS} \cdot |\mathbf{F}_n| / v_n^{sat})^2}} \left[\frac{\text{cm}^2}{\text{V} \cdot \text{s}} \right] \quad v_n^{sat} = 0.90 \cdot 10^7 \text{ [cm/s]}$$

$$|\mathbf{F}_n| = \left| \nabla\psi - \frac{\gamma^F}{n} \nabla(n \cdot U_{tn}) \right|$$

μ_p のモデルも同様に式 (2.4) で与える。これらのモビリティ μ を電子の運動量 p のバランス方程式から正しく解いて与える完全なバランスモデルは次の課題である。

以上の2つのモデルのシミュレーション比較を通して、次のことが分かった。

- (1) エネルギー輸送モデル: $(\text{HSE})_\beta$ は、 $(\text{HS})_\beta$ モデルに比べ、相互インダクタンス: $\frac{q_m}{Z_w}$ が、特にゲート長 $L_g = 0.1[\mu\text{m}]$ において 1.2 倍改善する現象が再現できた。
- (2) モビリティ μ_n 計算モデルは、電子飽和速度 v_n^{sat} によって電場依存モデル μ_n^{LISF} (式 (2.3)) が飽和するように仕向けたモデルになっているが、ドリフト速度を $\mu_n F_n$ ではなく $\frac{J_{nx}}{en}$ として見ると、エネルギー輸送モデル: $(\text{HSE})_\beta$ のドリフト速度は、 $(\text{HS})_\beta$ モデルの速度が $\mu_n F_n$ に近いやや小さい値になっているのに比べ、 v_n^{sat} を超える速度を持つことが分かる。この事は、速度オーバーシュートの現象を再現していると見える。今後は、電子の運動量 p のバランス方程式を正確に解いてモビリティ μ_n を決めた時に速度オーバーシュートがどう変わるかに関心がある。
- (3) シミュレーションした最大電子温度 $T_{n_{max}}$ [K] の値は、 $(\text{HSE})_\beta$ モデルは、 $(\text{HS})_\beta$ モデルに比べ $\frac{1}{3}$ 程度小さくなる。 $T_{n_{max}}$ の位置も、ドレイン側 SiO_2 界面にある $(\text{HS})_\beta$ モデルの最大位置から、 $(\text{HSE})_\beta$ モデルでは、最大位置が N_d ドーピングの外側に電場の勾配に沿って移動し SiO_2 界面から遠くなり、そのためホットエレクトロン量を見積もる HCG 値も小さくなる。 $(\text{HS})_\beta$ モデルにおいて、 $T_n = T_n(\mu_n^{LISF}(F_n(E)))$ として μ_n を通して電場 E と関係づけ計算する $T_{n_{max}}$ の位置は、ドレイン側 SiO_2 界面近く ($E \simeq Ex$) の Ex_{max} 近くになる。一方、電子電流の連続方程式に沿って電子エネルギーが流れるというバランス方程式を正確に解く: $div[J_n(\nabla\psi)]$ にしたがってエネルギーが流れる $(\text{HSE})_\beta$ モデルにおいては、電位 ψ の等高線の傾斜 ($\nabla\psi$) に沿って N_d ドーピングの外に $T_{n_{max}}$ が位置し、ドレイン側 SiO_2 界面から遠い位置になる。これらは、それぞれのモデルの特徴を良く現している。 $(\text{HSE})_\beta$ モデルは、 $T_{n_{max}}$ が下がるので、ホットエレクトロン量評価値 HCG も下がる。この結果は、ゲート長 $L_g = 0.1, 0.2[\mu\text{m}]$ とも適正と考える。
- (4) $(\text{HSE})_\beta$ モデルは、妥当な結果を得ていると考えられる。サブスレッショルド領域のしきい値電圧 V_{th} は、 $(\text{HSE})_\beta$ モデルでは、 $(\text{HS})_\beta$ モデルに比べゲート長 $L_g = 0.1, 0.2[\mu\text{m}]$ ともし寝てくるので、特性はやや悪くなる。
- (5) $(\text{HSE})_\beta$ モデルは、 $(\text{HS})_\beta$ モデルに比べ、非線形の方程式 (U_{tn} を解く) を BCGSTB で 1 本余計に解くので、全体の収束のためのガンメル反復の回数は 3 ~ 5 倍増え、そ

れによって CPU 時間も約 3 倍増えるが価値のある結果が得られる。メモリについては、元数 $n=44457$ とした時に、 $(HSE)_\beta$ モデルでは、 U_{tn} を解く 1 本の配列 355[KB]が増えるだけである。

11.1 追記

最後に、歴代のマシンの CPU 性能を比較しておく。参考にされたい。

$(HS)_\beta$ モデルにおいて、本シミュレーションに使ったマシン：日立 FLORA HP の dc7900SF Core2 Duo E8600(3.3GHz) 4GB メモリ、Windows XP(Fujitsu FORTRAN V4.0L10)にて、2 段階あみ目の第 1 段の計算機実行を行なうと、およそ 4 秒の CPU 時間を要する。元数で $n=11118$ ($M1 \times M2 = 102 \times 109$) であるので、帯行列の 1 配列： $(2 \times M1 + 1) \times n \times 8[\text{Byte}] = 18[\text{MB}]$ の領域を必要とする。

この 4 秒の CPU 時間は、15 年前のワークステーション：日立 HP712 / 100 では、439 秒(7 分 19 秒)かかり、現 PC マシンの 110 倍の CPU 時間がかかっていたことになる。もちろんメモリの制約もあった。この日立 HP712 / 100 は、日立の汎用機 M680H IAP2 付き(64MB, VOS3) とほぼ同等の性能だった。

また、2 つのプロセス (JOB) を同時に多重処理した時に、日立 HP712 / 100 の WS では、OS が UNIX 系 (hp-ux) なので多重処理に対応しているので、2 プロセスが、合計 CPU 時間： $4 + 4 = 8$ 秒で終了する。単体プロセスのちょうど 2 倍の CPU 時間で 2 プロセスが終了するわけである。この事情は、Windows 系 OS の PC では、OS がまともに多重処理に対応してこなかったために、かなりお粗末になる。2004 年当時の Windows 系 Pentium4 の PC では、2 プロセスが単体の 2 倍の CPU 時間で終了せず、全体の合計 CPU 時間で、3.3 倍の CPU 時間となった。現 PC では、Core2 によって OS も改善されてきており、2 プロセスの合計 CPU 時間は、2.3 倍程度になり、2 倍に近づいてきた。Table 11.1 にデスクトップについて整理しておく。

Table 11.1 PC Performance and Multi Process with CPU Time($n=11118$, $(HS)_\beta$)

WS/PC	OS	Clock	Fortran	CPU[s]	Multi	Mem	Date
HP712/100	hp-ux9.05	100MHz	V01-05/C	439(1.0)	2.0	96MB	1994
Pentium2	Windows98	400MHz	F-V2.0L10	131(0.3)	-	128MB	2000
Pentium3	Windows98	933MHz	F-V2.1L10	92(0.2)	-	256MB	2001
Pentium4	Windows2K	2.66BGHz	F-V4.0L10	22(0.05)	3.3	512MB	2004
Pentium4	WindowsXP2	3.20EGHz	F-V4.0L10	16(0.04)	2.5	1GB	2005
Pentium4	WindowsXP2	3.20GHz	F-V4.0L10	6(0.014)	3.2	2GB	2007
Core2 Duo	WindowsXP3	3.33GHz	F-V4.0L10	4(0.009)	2.3	4GB	2009

参考文献

- [1] 小柳光正, 岸野正剛著、VLSI デバイスの物理, 丸善, pp.156, Jul.1986
- [2] 香山晋編、超高速 MOS デバイス, 倍風館, pp.35-36, Feb.1996
- [3] Ruch, J.G., 'Electron Dynamics in Short-channel field effect transistors', IEEE Trans. on Electron Devices, ED-19, pp.652-659, 1972
- [4] 富澤一隆著、半導体デバイスシミュレーション, コロナ社, Dec.1996
- [5] Jai-Hyuk Song, Young-June Park, Hong-Shick Min, 'Drain Current Enhancement Due to Velocity Overshoot Effects and Its Analytic Modeling', IEEE Trans. on Electron Devices, VOL.43, NO.11, pp.1870-1875, Nov.1996
- [6] Jai-hoon Sim, 'An Analytical Deep Submicron MOS Device Model Considering Velocity Overshoot Behavior Using Energy Balance Equation', IEEE Trans. on Electron Devices, VOL.42, NO.5, pp.864-869, May.1995
- [7] Sheng-Lyang, Man-Chun Hu, 'An Analytical Drain Current Model for Submicrometer and Deep Submicrometer MOSFET's', IEEE Trans. Electron Devices, VOL.44, NO.11, pp.1986-1992, Nov.1997
- [8] Bernd Meinerzhagen, 'Consistent Gate and Substrate Current Modeling based on Energy Transport and Luckey Electron Concept', IEEE Trans. 504-IEDM 88.1988
- [9] Thomas Simlinger, Helmut Brech, Thomas Grave, Siegfried Selberherr, 'Simulation of Submicron Double-Heterojunction High Electorn Mobility Transistors with MINIMOS-NT', IEEE Trans. Electron Devices, VOL.44, NO.5, pp.700-707, May.1997
- [10] Kozo Katuyama, Toru Toyabe, 'A New Hot Carrier Simulation method based on Full 3D Hydrodynamic equation', IEEE Trans. IEDM 89-135, pp.6.2.1-6.2.4, Nov.1989
- [11] W.Hansch, 'Carrier Transport in Semiconductor Devices of Very Small Dimensions', Siemens AG, Central Research and Development, Microelectronics, Otto-Hahn-Ring 6, D-8000 Munchen 83, Fed.Rep.of Germany, pp.296-303
- [12] Bernd Meinerzhagen, Walter L.Engl, 'The Influence of the Thermal Equilibrium Approximation on the Accuracy of Classical Two-Dimensional Numerical Modeling of Silicon Submicrometer MOS Transistors', IEEE Trans. Electron Devices, VOL.35, NO.5, pp.689-697, May.1988
- [13] W.Hansch, Miura-Mattausch, 'The Hot-electron problem in small semiconductor device', J.Appl.Phys., VOL.60, NO.2, pp.650-656, Jul.1986
- [14] W.Hansch, S.Selberherr, 'MINIMOS3: A MOSFET Simulator that Includes Energy Balance', IEEE Trans. Electron Devices, VOL.ED-34, NO.5, pp.1074-1078, May.1987
- [15] Erasmus Langer, 'Numerical Simulation of MOS Transistors', Springer, IMA. VOL.59, semiconductors II, pp.225-280, 1994
- [16] 大谷修, 'コンピュータシミュレーションによるディープサブミクロン MOS 素子の最適化', 日立マイコン技報, VOL.7, NO.1, pp.21-28, 1993
- [17] C.M. スノーデン著, 浜口智尋, 谷口研二訳, 半導体デバイスのモデリング, 現代工学社, Apl.1988

- [18] 檀良編著、プロセス・デバイス・シミュレーション技術, 産業図書, Mar.1988
- [19] 富士総合研究所編、半導体素子設計シミュレータ, 丸善, Mar.1991
- [20] 小柳光正著、サブミクロンデバイス II, 丸善, Jan.1987
- [21] ストリートマン著、菊池誠監訳, 大串秀世, 黒須楯生, 松本和彦訳、接合型半導体, 東海大学出版会, Sep.1991
- [22] 村田健朗, 名取亮, 唐木幸比古著、大型数値シミュレーション, 岩波書店, Feb.1990
- [23] Shiuh-Wuu Lee, 'Universality of Mobility-Gate Field Characteristics of Electrons in the Inversion Charge Layer and Its Application in MOSFET Modeling', IEEE Trans. CAD-8, NO.7, pp.724-730, Jul.1989
- [24] S.Selberherr, 'MOS device modeling at 77K', IEEE Trans. on Electron Devices, VOL. 36, NO.8, Aug.1989
- [25] E.Takeda, Y.Nakagome, H.Kume, S.Asai, 'New hot carrier injection and device degradation in submicron MOSFET's', IEEE Proc. VOL.130, Pt.1, pp.144-150, Jun.1983
- [26] 村田健朗, 青木孝, 'ドリフト・拡散緒モデルにおける I_d 収束プロファイルと事後誤差評価について', 第25回数値解析シンポジウム講演予稿集, pp.96-99, May.1996
- [27] 小国力編著, 村田健郎, 三好俊郎, ドンガラ J,J, 長谷川秀彦著、行列計算ソフトウェア (WS、スーパーコン、並列計算機), 丸善, pp.252-275, Nov.1991
- [28] 村田健郎, CV法と、手作り数値シミュレーションシステムの奨め, 日本計算工学会, 計算工学 vol.3, No.1, pp.44-53, 1998
- [29] 村田健郎, CV法と、手作り数値シミュレーションシステムの奨め (第2回)-非線形純拡散問題と割線反復法-, 日本計算工学会, 計算工学 vol.3, No.3
- [30] 村田健郎, CV法と、手作り数値シミュレーションシステムの奨め (第3回)-移流拡散系の離散化: 特に指数法について-, 日本計算工学会, 計算工学 vol.3, No.4, pp.246-253, Dec.1998
- [31] 村田健郎, 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-, 日本計算工学会, 計算工学 vol.4, No.2, 1999
- [32] 村田健郎, 「BASIC 数学」連載: 線形数値計算法とその応用, 現代数学社, 1992
- [33] 村田健郎, 線形代数と線形計算法序節, サイエンス社, 1986
- [34] スハス V. パタンカー原著、水谷幸夫, 香月正司共訳、コンピュータによる熱移動と流れの数値解析, 森北出版, Feb.1985
- [35] 小国力著, MATLAB と利用の実際 [第2版], サイエンス社, 2001
- [36] 砂川重信著, 精講物理, 学生社, pp.342-344, Apr.1975
- [37] 松平升, 大槻義彦, 和田正信共著, 理工教養 物理学 I, 培風館, pp.103-105, Dec.1975