

デバイス シミュレーション

高田 育紀

平成 28 年 1 月 10 日

半導体デバイスの通常の動作は、デバイス シミュレータを用いて精密に計算できる。そのデバイス シミュレータが用いる計算式は比較的単純で、ポアソン方程式と正孔電流と自由電子電流のそれぞれの連続性とドリフト-拡散輸送モデル式を用いて、それらの連立解をデバイス全域で求めている。デバイスの動作機構の理解には、デバイス シミュレータの計算手順を辿ることが最短の手法と思われる¹。

1 パワーデバイス 動作解析の歴史

トランジスタの最初の動作理論は、J. Bardeen と W.H. Brattain が点接触形について 1949 年に行ったものである [1]。ところが、点接触形トランジスタの動作は 1959 年段階でも明瞭に説明されておらず [2]、その後の伸展もないまま今日に至っている。

一方、W. Shockley は、J. Bardeen らの 3 ヶ月後に pn ダイオードと接合形トランジスタの動作理論を発表した [3]。現在広く使われている pn ダイオードの小電流での動作モデルは、この 1949 年に発表された動作理論と同じものである。しかしながら、 pn ダイオード動作モデルは pn 接合を挟んだ電荷担体分布を徹底して説明してないために曖昧性を残している²。それを引き継いだ彼の接合形トランジスタ動

作理論は、内部電位に注目して多数の式を用いた抽象的なもので、とてもモデルとは言えない³。そのこともあって、現在に至るまで多様な説明が行われて定説がないが、まだしも合金形トランジスタ全盛期に用いられたモデルが用いられることが多い。

このモデルは、1960 年代初めまで主流であった Ge 合金型トランジスタのようにエミッタ、ベース、コレクタの各領域の不純物濃度がほぼ一定である場合には、比較的大きな電流の動作にも適用できたが、1960 年頃から現れたエピタキシャル形トランジスタには適してなかった。エピタキシャル形トランジスタは低不純物濃度のコレクタ n^- 領域を有しているが、この n^- 領域中に実質的なベース領域が拡がり、しかもその伸展距離がコレクタ電流密度 J_C によって変わるためである。加えて、ベースとエミッタ領域の熱拡散による形成方法がもたらす不純物濃度の傾斜が、解析をより難しくした。

このため、トランジスタの動作解析には数値計算が試みられ始めた。H. Gummel らは、1964 年に最初の 1 次元の計算を行ない [6]、1969 年には大電流密度動作を解析する計算手法を見出した [7]。

1970 年代の後半にはコンピュータ能力の増大と解法の改善が進んで、2 次元計算が本格的に行われ始めたが、その対象とするデバイスは、専ら MOSFET であった。FET は自由電子あるいは正孔の片方だけを考慮すれば良いので計算が簡単であった⁴。

ところが、それら両方を扱うバイポーラ デバイスへの数値計算の適用は遅れた。特に、高電圧大電

¹本文章は講義資料第 II 部 9 章 “デバイスシミュレーション” の内容にほぼ等しい。

²Shockley は、それを空間微分すれば電流密度 J_h , J_e が得られるという “擬フェルミ準位” を考案した。彼は、この概念を使って pn 接合を挟んだ電荷担体分布も巧妙に説明している。しかしながら、擬フェルミ準位を表す式には電荷担体密度の空間分布 $n_h(x)$, $n_e(x)$ を含んでいるので、求めようとする電荷担体分布を使ってそれ自体を求めることになる。彼の手順は論理的に破綻している。

³彼は三極真空管に倣って説明した [3], [4], [5]。トランジスタ動作の説明は、 pn 接合理論を扱った最初の文献 [3] の最後 3 頁で行ったが、それ以後 言い換えることはなかった。

⁴再結合現象も考慮する必要がない。

流⁵バイポーラ デバイスでは、十数桁も変化する数値を扱わねばならないために、それまでの反復法では収束しなかったのである。数百 V 以上のパワーデバイスのシミュレーションが実用化したのは、全ての変数の微係数を完全に考慮したニュートン法が効果的であると判った 1980 年代中頃であった [8]。

ともかく、開発当初後、トランジスタ (BJT) の動作を物理現象としてモデル化する試みは途絶えた⁶。数値解析も、数百 V トランジスタの 1 次元計算を扱った 1982 年の文献 [12] を最後に進歩してない。

パワーデバイスの開発にデバイス シミュレーションが大きな役割を果たしたのは、IGBT 以降である。それまでのパワーデバイスの開発は、基本的に簡単な経験則を基に試行錯誤で行われてきた。ところが、IGBT は、構造因子もプロセス因子も多かったために、適切な設計指針を机上で予想することは極めて困難であった。シミュレータを使うと多くの設計因子や製造因子を変更したデバイス特性が簡単に得られるので、試作と評価に掛ける手間と時間を画的に省くことができた。

その反面、何も考えなくとも特性の改善が進むので、深い考察が疎かになった傾向は否めない。IGBT の特性は年々進歩したが、動作解析をシミュレーションを活用して行った例は少ない⁷。

半導体デバイスの中でもバイポーラ デバイスの動作解析が難しいのは⁸、内部の電荷担体密度 n_h, n_e が動作状況で桁違いに変化することに起因する。何よりも、内部の電荷担体分布が知ることが、バイポーラ デバイスの動作を理解するための鍵である。

⁵実は、現在の超 LSI よりも一桁低い電流密度である。

⁶トランジスタ内部の電荷担体密度分布を直接考えずに、回路要素としてトランジスタを理解する端子特性モデルの理論は、J. Ebers と J. Moll による大信号動作理論 [9] を端緒として大きく進歩して、集積回路の特性シミュレーションを基本技術となっている。1982 年までのトランジスタ動作理論の発展経緯は文献 [10] 第 1 章が詳しい。その後、電力用トランジスタの大電流特性を説明する試みがあったものの、成功していない (例えば [11])。

⁷破壊現象の解析例として文献 [13] がある。一番簡単なはずのオン動作の解析は、最近になってようやく発表され始めた [14]。IGBT 動作の理解には、シミュレータは不可欠の道具であった。

⁸実際、バイポーラ デバイスのデバイス シミュレータの開発は MOS 系デバイスに比べて大幅に遅れた。1994 年にスイス工科大学の一研究室が開発したシミュレーターが現在最も流通しているが、その成功要因としてバイポーラ パワーデバイスに重点を置いていたことが大きいと、著者は考えている。

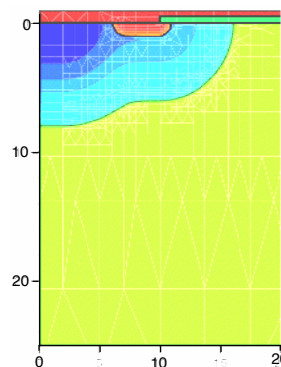


図 1: 不純物分布と mesh の例 (単位: μm)

2 デバイス シミュレータの計算手順

デバイス シミュレーションには次の手順を踏む。

1. 計算サンプルの構造を確定する。例えば MOSFET を計算する場合、構成要素の材質 (Si, poly Si, SiC, SiO₂, etc.) とその寸法を指定する⁹。
2. ソース、ドレインそしてゲート電極の接続場所を指定する。材質の指定は不要である。
3. 半導体領域に不純物分布を設定する¹⁰。
4. 半導体領域に仮想的な網 (mesh) を設定する。図 1 は、その状況を MOSFET のソース領域近傍について表示した例である。計算に関する物理量の変化が大きいところでは、網目 (mesh) の間隔が狭く設定されている¹¹。

⁹1 次元や 2 次元シミュレーションの場合、指定されない次元は $1\mu\text{m}$ として計算は行われる。計算結果を電流密度で得るためには、面積の換算係数 (Area Factor) を設定せねばならない。

¹⁰ここまでの 3 段階は、素子断面を輪郭図として与え不純物分布を (表面からの) 関数として明示する方法と、プロセス シミュレータを使う方法がある。後者は、実際の制作に対応した写真製版用マスク図面を描き、実際のウエハ製造工程に沿った熱処理工程等を順に仮想的に行って、最終的な不純物分布や酸化膜厚を得る。処理温度とか処理時間とかの工程条件を、操作者は入力する。

¹¹シミュレータが、不純物濃度が変わる所では自動的に網目 (mesh) を小さくする。それに加えて、計算者が任意に網目 (mesh) の大きさを指定することも出来る。

網目の各節点 (node) が保持する基本情報は、位置 (x, y, z) 、不純物イオン密度 N_A, N_D 、移動度 μ_h, μ_e 、再結合速度 R 、対発生速度 G ¹²、温度 T 等がある。

基本的な計算値は、電位 EP ¹³、正孔密度 n_h 、自由電子密度 n_e である。電界強度 EF (Electric Field)、電流 J_h, J_e や正味の電荷密度である空間電荷密度 SC ¹⁴とかは、これらを基に計算することが出来る。

シミュレータは、サンプル構造の境界に垂直な方向で物理量に変化しないことと外部電極電位を境界条件として、全ての節点 (node) で3節で述べる基本方程式群が自己矛盾無く成立する解を求めようとする¹⁵。それは、非線形多元連立方程式を解く作業となり、方程式が一次関数でない状況では多数回の演算を繰り返し解に近づく操作が必要となる¹⁶。

例えば、MOSFET の出力特性 (J_D-V_{DS} 曲線の V_{GS} 依存性) を計算したい場合、まず、外部電圧を加えずに ($V_{DS} = V_{GS} = 0V$)、温度が均一である状況、すなわち熱平衡状態の解を求める。全ての節点には、各々の計算結果が保持される。

次に、ゲート電圧 V_{GS} を、 $0V$ からわずかに高く設定し解を求める。何回か計算を繰り返しても収束しない場合は、 V_{GS} の変化量を小さくして同じ手順を繰り返す。計算が収束した場合は、 V_{GS} の設定をわずかに高くする。シミュレータは、自らこのような判断をしながら V_{GS} の目標値まで計算する。その途中の任意の V_{GS} 値で全節点の基本情報と計算結果をファイルに保存する指定も出来る¹⁷。

次に、あるゲート電圧 V_{GS} の計算結果を読み込み、ドレイン電圧 V_{DS} を連続的に増大させて行けば、一本の J_D-V_{DS} 曲線を得ることができる。これを他の V_{GS} 値でも繰り返して、出力特性 (J_D-V_{DS} 曲線の V_{GS} 依存性) を描く情報が得られる¹⁸。

V_{GS} なり V_{DS} を漸増させるのは、計算を収束させるための手段であって、各条件での計算は自己完結している。このため、計算を積み上げることに因る誤差の増大はない。

以上の説明では、外部条件 (電極電圧) が定まった状態での計算を繰り返した。このような手順は、“準定常シミュレーション” (quasi static simulation) と呼ばれている¹⁹。半導体デバイス自体の特性を評価する基本的な手法である。

これに対して、回路中のデバイスの振る舞いを知りたい場合には、外部条件 (電極電圧、電流) が時間的に変動する場合を取り扱わねばならない。その状況が、“過渡シミュレーション” (transient simulation) である。もっとも、シミュレータが使う基本式群には始めから時間の影響 (時間微分項) を含んでいる。このため、外部条件が定めるある時間的な変化量が得られるまで、それよりもごく短い時間単位で全体の状況が収束する状態 (計算) を積み上げて行けばよい。その外部条件は、時間的に変化する電圧源が電流源を含む回路をデバイスに接続し、回路シミュレータを動かして設定する²⁰。“過渡シミュレーション”は、“準定常シミュレーション”よりも大幅に時間が掛かり、収束の困難性も増える。

デバイス シミュレーションは有限要素解析 (Finite Element Analysis)²¹の一種で、“入力”、“演算”、“出力”の機能を具えている。数学的な処理である“演算”はブラックボックスと見なさざる得ないが、“入力”と“出力”の処理も解析の成否を大きく左右す

¹²SRH 形再結合については $R=-G$ とするが、他の再結合モデルでは R と G は独立に設定していると、著者は判断する。

¹³Electric Potential あるいは Electrostatic Potential.

¹⁴正味の電荷密度で $SC=-N_A+N_D+n_h-n_e$ で表される。“空間”は、表面でなく3次元空間に存在することを意味する。

¹⁵“電極に接する箇所の半導体の電荷担体密度が熱平衡値である”ことと“通常の電極接続部では電圧降下がない”という重要な境界条件も、シミュレータは内蔵している。

さらに、デバイスの自己発熱を考える場合は、周囲との熱的な接触部位と熱抵抗、周囲温度等の条件が加わる。

¹⁶基本変数が指数的に変わるパワーデバイスのシミュレーションは難しい部類の計算である。1次元、2次元、3次元となるにつれ、急激に計算時間は長くなる。2010年段階では、3次元シミュレーションは現実的でない。この方程式を解く機能は“solver”と呼ばれ、その効率的な解法は数学として独立した課題である。

¹⁷シミュレータは、最終計算結果の全節点の情報と、途中の端子特性 (各電極の電圧と電流) 値は必ず保存する。途中の全節点情報の保存はオプションとして指定する。

¹⁸これら計算結果を視覚的に理解し易いよう表示したり、外部パソコン等へ出力できる能力も重要なシミュレータの機能である。

¹⁹基本式 (式2) と (式3) の右辺第2項を省いて計算する。他に、比率が小さいことから変位電流も無視している。

²⁰回路シミュレータはデバイス シミュレータよりも遙かに簡便なので、それとの組み合わせは、主要デバイス以外の素子 (部品) をシミュレータに組込む手間も計算時間も桁違いに節約できる。

²¹基になる有限要素法は、連続体を有限寸法の部分に分けて計算することの特徴とする。

る。シミュレータの供給者は、“演算”を行う“solver”の開発に最も力を入れる。そして、“入力”と“出力”の処理を助けるツールキット²²を用意する。

計算対象構造と計算目的、計算に用いる物理モデルの設定²³と、計算結果の評価はあくまで操作者に任されている。開発者は、これらの設定をよく考えねばならない。また、それ以上に計算結果の評価が難しいことを肝に銘ずるべきである。デバイスシミュレータは、最適条件を見つける目的には極めて有用であるが、容易な使用は本筋を誤って却って遠回りになることは歴史が示している。

3 デバイスシミュレータが使う 基本方程式群

デバイスシミュレータは、全節点でポアソン方程式(式1)と正孔電流と自由電子電流の連続方程式(式2)、(式3)が連立する条件を計算する。

それに加えて、最も簡単な“ドリフト-拡散輸送モデル”を使う場合には、(式4)と(式5)の成立が条件に加わる²⁴ [15]。この輸送モデルでは、電流は電荷担体の拡散成分(右辺第1項)とドリフト成分(右辺第2項)の和で表される。

$$\epsilon_r \epsilon_0 \nabla^2 \psi = -q(n_h - n_e + N_D - N_A) \quad (1)$$

$$-\nabla \vec{J}_h = qR + q \frac{\partial n_h}{\partial t} \quad (2)$$

$$\nabla \vec{J}_e = qR + q \frac{\partial n_e}{\partial t} \quad (3)$$

$$\vec{J}_h = -qD_h \nabla n_h - q\mu_h n_h \nabla \psi \quad (4)$$

$$\vec{J}_e = qD_e \nabla n_e - q\mu_e n_e \nabla \psi \quad (5)$$

ϵ_r : 半導体の比誘電率 (12 : Si, 16 : Ge)

ϵ_0 : 真空の誘電率 ($8.9 \times 10^{-12} \text{ F/m}$)

ψ : 半導体中の電位 (Electric Potential)

q : 電気素量 ($1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$)

N_A, N_D : アクセプター, ドナーイオン密度

n_h, n_e : 正孔密度, 自由電子密度

\vec{J}_h, \vec{J}_e : 正孔, 電子の電流密度

D_h, D_e : 正孔, 自由電子の拡散係数

μ_h, μ_e : 正孔, 自由電子のドリフト移動度

R : 再結合速度/単位体積 (定数)

実は、これらの中で(式2)と(式3)は半導体物理に固有の方程式である。電流を正電荷を有する荷電体の流れと見なした本来の連続方程式は(式6)で、再結合速度 R の項は含まない。

$$\nabla \vec{J}_h = -q \frac{\partial n_h}{\partial t} \quad (6)$$

さて、この式の両辺を体積積分して、左辺に Gauss の発散定理を適用すると(式7)を得る。

$$\begin{aligned} \int \nabla \vec{J}_h dV &= -q \int \frac{\partial n_h}{\partial t} dV \\ \int \vec{J}_h dS &= -q \int \frac{\partial n_h}{\partial t} dV \end{aligned} \quad (7)$$

この式は、ある領域表面から流れ出る総電流密度がその領域中の電荷担体 n_h が単位時間に減少する速度に等しいことを示している。さらに、ある領域表面から流れ出る総電流密度が0であることは、その領域を経由する電流密度 \vec{J}_h が変化しないことを意味している。これが、(式6)が電流の“連続方程式”と呼ばれる由縁である²⁵。

そして、正孔電流密度 \vec{J}_h と自由電子電流密度 \vec{J}_e と合わせると、(式8)と(式9)を得る。

$$\nabla(\vec{J}_h + \vec{J}_e) = q \left(\frac{\partial n_e}{\partial t} - \frac{\partial n_h}{\partial t} \right) \quad (8)$$

$$\int (\vec{J}_h + \vec{J}_e) dS = q \int \left(\frac{\partial n_e}{\partial t} - \frac{\partial n_h}{\partial t} \right) dV \quad (9)$$

この(式9)から、ある領域を経由することで全電流密度 \vec{J} が変化しない条件は、その領域中の正孔密度 n_h と自由電子密度 n_e の時間変化率がどちらも0である必要はなく、両者の変化率が同じであればよいことが判る。

²⁵一般的に連続方程式は質量保存則の一形態と見なし得るのだが、この場合は電荷量保存則に当たる。

²² mesh の自動作成, 計算出力のグラフ化 etc.

²³ ドリフト移動度の不純物濃度, 温度, 電界強度等の依存性や再結合/対発生モデルとその中のライフタイム, 温度係数 etc.

²⁴ サブミクロン以下の微細な構造には、これらの式が異なる別のモデルが推奨されている。

それは、半導体中では、それを引き起こす原因に拘わらず、結果として正孔電流の一部と同じ値の自由電子電流が入れ替わる状況に他ならない。その原因である正孔密度 n_h と自由電子密度 n_e の時間変化率が同じになる機構として、エネルギー E_g の変化を伴う場合と伴わない場合が考えられ得る。

- (1.) E_g が変わる再結合/対発生現象.
- (2.) E_g が変わらない再結合/対発生現象.

(2.) は奇妙に思われるかも知れないが、半導体と電極の接触部とか、例えば長い n 領域の端に流入した正孔が徐々に消滅する状況で、このような現象が現実には起きていることは確かである²⁶。

そして、これらの現象の変化が電気回路中の時間変化に較べて桁違いに高速であれば、 $\partial n_h / \partial t$ 等で表す電流の変化とは別次元で起きていると解釈するのが適切である。そして、このような状況に対する n_h と n_e の時間変化率を R で表した式が、(式 2) と (式 3) である。

すなわち、(式 2) と (式 3) 中の R は再結合速度と説明されているが、“再結合” が含む曖昧さを避けて、 qR を“正孔電流と自由電子電流が入れ替わる速度”と解釈するのが適切である。

ところで、(式 2) は、 $\partial n_h / \partial t = 0$ の定常状態では、($R \neq 0$ の範囲を) 積分すると (式 10) になる。

$$J_h = -q \int R dx \quad (10)$$

半導体における電流は、(式 4) の右辺を構成する (1.) 拡散電流と (2.) ドリフト電流がよく知られているが、この (式 10) が示す (3.) 再結合電流も存在する訳で、正孔電流密度 J_h は両式を併せた値となる。ただし、(3.) の再結合電流が、一見 (1.) の拡散電流のように表される場合もある²⁷。

²⁶すなわち、このような箇所ではエネルギー損失 (発光/発熱) は通常観測されない。

²⁷例えば、Shockley の理想的 pn ダイオード動作式には、例えば $L_h \equiv \sqrt{D_h \tau_h}$ の形で τ_h が含まれている。それは、 n 領域における正孔電流は再結合電流 $J_{h,rec} = q \int_n R dx = q \int_n (n_h / \tau_h) dx$ に他ならない為である。

$$J = qn_i^2 \left(\frac{D_{hn}}{L_n N_D} + \frac{D_{ep}}{L_p N_A} \right) \left[\exp\left(\frac{qV}{kT}\right) - 1 \right] \quad (11)$$

さて、 μ_h, μ_e, R は、操作者が選ぶパラメータである。 D_h, D_e は、 μ_h, μ_e から (式 12) のアインシュタインの関係式を満たすように算出されている²⁸。

$$qD = kT\mu \quad (\text{Einstein の関係式}) \quad (12)$$

ドリフト移動度 μ は最も重要な物理モデルで、これを欠いた計算は考えられない。 μ は不純物濃度 N_A, N_D 、電荷担体密度 n_h, n_e 、そして温度 T の関数である。また、シリコンでは $1 \times 10^4 \text{V/cm}$ 程度以下では電界強度 EF に依存しないが、それ以上では漸次 $\mu \propto 1/EF$ 特性となる。それぞれの要因に対して、幾つかのドリフト移動度のモデルを指定できる²⁹。

R は、単位体積当たりの正孔と自由電子の再結合速度である。 R には、幾つかの機構 (直接再結合、線形再結合、SRH 形再結合、Auger 再結合) があり、それぞれに対してライフタイム τ_h, τ_e を設定できる³⁰。

SRH 形再結合機構での空乏層中の電荷発生現象は、 R の値が負になることで自動的に取り込まれる。また、衝突電離作用に因る電荷担体の発生速度 G_{II} は、負の再結合速度 $-R$ として扱われる (式 13)³¹。

$$-R = G_{II} = G_{IIh} + G_{IIe} \quad (13)$$

$$G_{IIh} = \alpha_h v_{s,h} n_h \quad (14)$$

$$G_{IIe} = \alpha_e v_{s,e} n_e \quad (15)$$

α_h, α_e : 正孔と自由電子の衝突電離係数

$v_{s,h}, v_{s,e}$: 正孔と自由電子の飽和速度

再結合現象や衝突電離現象は、ドリフト現象と違ってそれらを必要としない状況もあるので、操作者が“物理モデル”に加えなければ計算に含まれない。

²⁸デバイス シミュレータでは、移動度 μ の設定は任意にできるが、拡散係数 D については設定できない。

この式は、1905 年に A. Einstein が重力等の外力が動く状況で溶液中の微粒子が拡散するブラウン運動を解析する過程で導いた。

²⁹各モデルは、それを提起した論文の著者の名前で呼ばれている。市販のシミュレータでは、不純物濃度と温度の依存性は既定条件で含まれているが、電荷担体密度依存性と高電界でのドリフト速度の飽和現象は操作者が付け加えねばならない場合が多い。

³⁰反応断面積 σ_h, σ_e で表す場合もある ($1/\tau = \sigma v_d n$)。

³¹なお、シミュレータには、電界強度 EF と温度 T の関数として衝突電離係数 α_h, α_e を与えるモデルが何種類か内蔵されている。

4 ボルツマン分布則の扱い

ボルツマン分布則 $[\exp(-\Delta E_{ab}/kT) = N_a/N_b]$ を、シミュレータは明示的に扱わない。ところが、輸送モデルの (式 4) と (式 5) において電流密度 J_h , J_e を 0 とすると、ボルツマン分布則が現れる。

例えば (式 4) で、 $J_h=0$ とすれば (式 16) を得る。これに Einstein の関係式 ($qD_h = kT\mu_h$) を適用して、 x 方向のみを考えると、変数分離形の積分ができて、正孔密度 n_h が静電電位 ψ の指数関数として導かれる (式 18)。同様に、自由電子密度 n_e については (式 19) が得られる (C は積分定数)。

$$\frac{1}{n_h} \frac{dn_h}{dx} = -\frac{\mu_h}{D_h} \frac{d\psi}{dx} \quad (16)$$

$$\frac{1}{n_h} \frac{dn_h}{dx} = -\frac{q}{kT} \frac{d\psi}{dx} \quad (17)$$

$$\int \frac{dn_h}{n_h} = -\frac{q}{kT} \int d\psi$$

$$\ln n_h = -\frac{q}{kT} \psi + C$$

$$n_h = C \exp\left(\frac{-q\psi}{kT}\right) \quad (18)$$

$$n_e = C \exp\left(\frac{q\psi}{kT}\right) \quad (19)$$

すなわち、“ドリフト-拡散輸送モデル”では、正味の電流密度がゼロとなる状況 ($J=0$) においてアインシュタインの関係式とボルツマン分布則は同じ意味を持つといえる。

ところで、(式 17) は (式 20) と解釈することが出来る。この式は、電荷担体粒子 1ヶ当たりの拡散運動による熱運動エネルギー kT の空間変化率 (左辺) とドリフト運動によるクーロンエネルギー $q\psi$ の空間変化率 (右辺) がバランスしていることを示している。この状況は、(式 16) の左辺と右辺に対応する拡散機構とドリフト機構による移動速度が逆向きで大きさが等しい場合には当然である。この点からも、 $J=0$ ならば、アインシュタインの関係式とボルツマン分布則は共に有効と言える。

$$\frac{1}{n_h} \frac{d(kTn_h)}{dx} = -\frac{d(q\psi)}{dx} \quad (20)$$

拡散電流とドリフト電流のバランスが崩れ、それらの差に相当する正味の電流が流れている場合でも、

表 1: 100 μm *pin* ダイオードのアノード接合の全電流とドリフト電流の最大値の計算例 @ $V_{AK} = 1V$

	J_h	J_e
$J_{drift(max)}$	63.3kA/cm ²	-35.7kA/cm ²
J_{net}	-141A/cm ²	-234A/cm ²
$J_{drift(max)}/J_{net}$	$\times(-446)$	$\times 153$

正味の電流の割合がわずかであれば、アインシュタインの関係式とボルツマン分布則は近似的に成立することが期待できよう³²。

表 1 に、デバイス・シミュレータで得られた正孔と自由電子の電流密度 J_h , J_e と、アノード接合部近傍におけるドリフト電流成分 $J_{h,drift}$, $J_{e,drift}$ の比較を示す。正味の電流密度 J_e あるいは J_h に対するドリフト電流の最大値 $J_{drift(max)}$ の割合は、カソード接合近傍の場合も含め 150~400 倍程度になる。このため、少なくとも 100 μm *pin* ダイオードの $V_{AK} = 1V$ あるいは $J_A \approx 400A/cm^2$ 程度の動作状況では、“正味の電流密度 J_h , J_e が実質的に 0 である”とする近似が十分に許されると判断できる。

シミュレーションを行ったダイオード構造は、均一な不純物濃度で、電荷担体の再結合機構は含んでいない。 $(N_p = N_n = 10^{18}cm^{-3}, N_i = 10^{14}cm^{-3}, t_p = t_n = 10\mu m, t_i = 100\mu m)$

5 デバイス シミュレータを使う際の注意点

デバイス シミュレータを使う際には、“物理モデル”の選択が極めて重要である。“物理モデル”は、

³²文献 [10] p.15~p.16 では、「アインシュタインの関係式は熱平衡状態でボルツマン分布近似が許される場合に成り立つが、実際は拡散成分とドリフト成分の絶対値が非常に大きく、両者が互いにほとんど打ち消しあっていて、これらのわずかな差が電流をあたえているので、アインシュタインの関係式は非平衡状態にまで拡張して適用されることが多い」と説明している。また、文献 [16] には、*pn* 接合の少なくとも片側の電荷担体密度が低いとボルツマン分布と見なせるとある。

シミュレータが数学的に計算する環境設定に当たる。その最も基本的な項目は、エネルギーギャップ E_g や真性電荷密度 n_i である。また、3 節で述べた基本方程式群中のドリフト移動度 μ_h, μ_e と再結合や対発生の反応速度 R も“物理モデル”の項目である。

シミュレータには、 E_g や n_i とか μ_h, μ_e といった計算に必須の項目については、一般的に妥当な設定が始めから組み込まれている。再結合とか衝突電離は、無くてもよい計算もあるので、操作者が必要に応じて組み込むように指示をしなければならない。そして、これらそれぞれの項目に対して、複数のモデル(すなわち計算式)が用意されており、操作者が選ぶことができる³³。また、出来合いの物理モデルに満足できない場合には、操作者が独自の計算式を設定することが可能である³⁴。

ところで、シミュレータ供給会社は、シミュレータが用意している“物理モデル”の妥当性を保証していない。彼らは、物理現象の正確な再現でなく“演算”の正確さを責務と考えている³⁵。ドリフト移動度 μ や再結合や対発生の反応速度 R にしても、文献に現れたモデルを適宜選択してシミュレータで使えるように準備するだけである。多数のモデルのどれを選択し、そのモデルのパラメータをどう設定するかは、使用者が決めねばならない。計算結果の正確さについても、使用者が責任を持たねばならない³⁶。

デバイスシミュレータの操作者は、“物理モデル”の如何なる項目を使っているか、その項目に対するモデル(計算式とその中の係数)が妥当であるかを、常に明白に認識しなければならない。

ドリフト移動度 μ は、不純物濃度依存性と温度依存性は始めから含まれているが、ドリフト移動度の

高電界効果(すなわち飽和速度)や電荷担体密度依存性(キャリア-キャリア散乱)は指示が必要である³⁷。バンドギャップ縮小効果 ΔE_g は始めから含まれているが³⁸、衝突電離効果(α_e, α_h とその温度依存性)を含めるには指示を加えねばならない。

“物理モデル”の設定で最も留意せねばならない項目が“再結合(対発生)モデル”である。シリコン素子の場合、通常は SRH 形再結合で十分で、余程の大電流動作には Auger 再結合を加えれば良く、直接再結合は無視できるとするのが常識である。ところが、正孔と自由電子の両方を同時に扱うバイポーラ素子のシミュレーションでは、単純な SRH 形再結合の設定では観測値を再現できないというのが、経験者の実感である。具体的に、以下のような問題がある。

1. SRH 形再結合モデルのライフタイムの標準的な値($\tau_e = 10\mu s$)から計算したリーク電流値は、測定値より 2 桁も大きい。
2. 白金拡散ダイオードの特異リーク電流が SRH 理論に合わない。
3. 伝統的な再結合モデルを用いると、*pin* ダイオードの降伏現象やパワーデバイスの宇宙線誘起破壊を全く再現できない³⁹。
4. なによりも、*pin* ダイオードの $J_F - V_F$ 特性と、その温度依存性を説明できない [17]。

これらの解決には、項目 (1.) に対しては、SRH 形再結合はリーク電流やオン電流の極小電流領域に限って⁴⁰、代わりに単純な線形再結合($R = n_h/\tau_h$ or $R = n_e/\tau_e$)を用いれば良い。また、項目 (3.) に対しては、電界強度依存性のある直接再結合モデルを(シリコンにおいても)併せて用いる必要があると著者は考えている [17]。

³³それらは、温度 T とか電界強度 EF の変数であるのが普通である。それらの係数は一覧表になっており、操作者がその中の値を変えることも出来る。操作者は、“物理モデル”の項目自体、その中の計算式、式中の係数という 3 段階に渡って選択し得る。

³⁴使える変数は基本的なものに制限されるとか、特定の変数に対する微分値が連続でなければならないとかの条件が加わる。

³⁵計算の収束性、計算速度、使い勝手等で競い合っている。

³⁶「シミュレーションには“evaluation”が極めて重要である」と、デバイスシミュレータ“dessis”を作った ISE 社(Integrated Systems Engineering AG)を創設した W. Fichtner が強調していた。“evaluation”とは、実際の測定結果に合うように、使用する“物理モデル”のパラメータを調整することである。

³⁷以下、Synopsis 社のデバイスシミュレータ dessis を例にとって説明する。始めから含まれている項目についても、その計算式の選択や、計算式が使うパラメータ値の変更が可能である。

³⁸勿論、それを使用しないという指示はできる。

³⁹それぞれ、東工大 ocw 補足資料“パワーデバイス動作限界の概略”と“パワーデバイスの宇宙線誘起破壊の概略”を参照されたい。

⁴⁰しかも、その標準値は $\tau_e \approx 1ms$ 程度とすべきであろう。

参考文献

- [1] J. Bardeen and W. Brattain, "Physical Principles Involved in Transistor Action," Bell System Technical Journal Vol.28, No.2, pp.239-277, 1949-4
- [2] 菊池 誠, 垂井 康夫, 柳井 久義, 菅野 卓雄, 電気学会大学講座トランジスタ, §2.7, pp.71-73, 電気学会, 1959
- [3] W. Shockley, "The Theory of p-n Junctions in Semiconductors and p-n Junction Transistors," Bell System Technical Journal Vol.28, No.3, pp.435-489, 1949-7
- [4] W. Shockley, Electrons and Holes in Semiconductors -with applications to transistor electronics-, D. VAN NOSTRAND COMPANY, INC., 1950.
W. Shockley, 半導体物理学 上, 下, 吉岡書店, 1957
- [5] W. Shockley, M. Sparks, and G. K. Teal, "p-n Junction Transistors," Physical Review, Vol. 83, No. 1, pp.151-162, July 1, 1951
- [6] H. K. Gummel, "A Self-Consistent Iterative Scheme for One-Dimensional Steady State Transistor Calculations," IEEE Transactions on Electron Devices, No.ED11, pp.455-465, October 1964
- [7] D. L. Scharfetter, H. K. Gummel, "Large Signal Analysis of a Silicon Read Diode Oscillator," IEEE Trans. on Electron Devices, ED-16, p.64, 1969
- [8] A. Nakagawa, S. Nakamura, and T. Shinohe, "Rapid convergence bipolar-MOS composite device model -TONADO II- and its application to Bipolar-Mode MOSFETs (IGBT)," proceeding of NASEC-ODE V, p.297, 1987
- [9] J. J. Ebers and J. L. Moll, "Large-signal behavior of junction transistors," proceeding IRE, Vol. 42, pp.1761-1772, 1954
- [10] 倉田 衛, バイポーラトランジスタの動作理論, 近代科学社, 1980
- [11] B. J. Baliga, POWER SEMICONDUCTOR DEVICES, Chap.5, pp.198-257, PWS Publishing Company, 1996
- [12] M. Kurata, Numerical Analysis for Semiconductor Devices, Lexington Books, 1982
- [13] I. Takata, "A Trial Simulation of the Fourth Secondary Breakdown on IGBTs," proceeding of IPEC-Niigata, S48-3, 2005-4
- [14] 高田 育紀, "IGBT オン特性の疑似 pin ダイオードによるエミュレーション," H21 電気学会研究会資料, EFM-09-025/EDD-09-059/SPC-09-126, pp.49-54, 2009-10-29
- [15] 電気学会編, パワーデバイス・パワー IC ハンドブック, 3.5 節 "デバイス シミュレーション技術", pp.74-75, コロナ社, 1996
- [16] A. van der Ziel, "Boundary conditions for forward biased p-n junctions," Solid-State Electron., Vol.16, pp.1509-1511, 1973
- [17] 高田 育紀, "SRH 再結合モデルの問題点とその解決策の提言," H18 電気学会研究会資料, EDD-06-66/SPC-06-133, pp.105-110, 2006.
I. Takata, "Problems on the SRH Recombination Model and a Proposed Solution," proceedings of ISPSD'06, pp.193-196, 2006