

半導体における量子流体の数値とシミュレーション

小田中 紳二

1 はじめに

自然現象や工学の諸問題から数学モデルを立て、コンピュータ上で取り扱える計算モデルを構築し、効果的な計算アルゴリズムを開発して数値シミュレーションを行う手法は、複雑な科学技術の問題を解決するのに大きな影響を与えてきた。近年、地球環境、情報、生命、ナノテクノロジーなどの科学技術分野において、このような手法は新たな知見を得る試みとして広く進展している。このため、数学的に基礎付けられた計算モデルの構築や数学的手法によって数値モデル構造を明らかにすることが重要になっている。半導体に関する科学技術分野もその一つであり、半導体内における電子輸送の研究は、物理的関心事であるだけでなく、集積回路を構成する機能素子や記憶素子の性能と深く関係付けられる。また、その数値シミュレーションは半導体素子の性能予測や評価解析に用いられ、半導体産業においては半導体素子のコンピュータ支援設計技術 (Computer-Aided Design) として広く用いられている。

室温下 (すなわち、電子輸送の観点からは高温下) の半導体内の電子輸送シミュレーションは、多体系のモデリングを基礎として、Boltzmann 輸送方程式のモーメント展開から質量保存、運動量保存、エネルギー保存式を導き出して保存則と呼ばれる流体モデルを構成することによって実現されてきた [1]。一方、極低温下における半導体内において見られる電子の局在現象は Anderson 局在と呼ばれるが、不規則系における量子輸送現象として小谷らによって数学解析の研究が進められた [2]。ここで不規則系とは半導体内にドーピングされたランダムな不純物の分布であり、Anderson 局在下では、電子輸送を記述する Schrödinger 作用素のスペクトルは点スペクトルとなり、対応するすべての固有関数は指数関数的に減少する。その話題は本誌においても幾度となく取り上げられてきた興味深い数学の問題である [3],[4]。

現在、半導体素子は数 nm まで微細化が展望されており、このような極微構造においては、半導体輸送は新たな基礎科学の問題を提供している。すなわち、1. 情報伝達の素過程 (固体素子) を見るよい実験場であり、2. 場 (静電場や電磁場など) におけるナノフローとしての物理現象であり、3. 量子輸送や流れに関する興味ある数学モデルを提供している。このような極微構造においては、室温下 (高温下) においても量子性をどのようにモデル化するかが新たな課題であり、Schrödinger 方程式の流体表現の研究が大きな関心を集めている。この研究を基に、近年、いわゆる量子流体方程式を導出して電子輸送モデルを構築する試みがなされている [5],[6]。量子流体方程式は階層的モデル構造を有しており、今だその数学的構造解明は十分ではなく、数学解析を必要としている分野である。また、このような問題の数値シミュレーションを実現するには、単に今までの計算理論を応用するだけでなく、数

学的側面と物理学的側面から新たな計算理論を構築して計算モデルを構成することが必要となる。

本稿では、半導体における量子流体モデルについて解説し、そのモデル階層の一つである量子ドリフト-拡散方程式の数学解析と計算モデルの構成との関連性について述べる。量子ドリフト-拡散方程式の境界値問題において、定常解の存在証明のために構成する不動点写像と量子ドリフト-拡散モデルの反復解法アルゴリズムとは密接に関係する。さらに、非定常な量子ドリフト-拡散方程式の数値スキームを紹介することによって、半導体輸送における物理モデル、数学モデル、計算モデルと数値シミュレーションとの関連を概観する。

2 Wigner-Boltzmann 方程式

Schrödinger 方程式の流体表現の研究は、de Broglie, Madelung, Bohm らによってはじめられ [7],[8], Schrödinger 方程式を Madelung 変換や Wigner-Wyle 変換して物理・化学現象のモデル方程式が導出されている [9].

今, $R^d, d = 1, 2, 3$, において電子輸送を記述する Single-state Schrödinger 方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_i(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_i(x, t) + V(x, t) \psi_i(x, t) \quad (1)$$

を考え、この方程式を Wigner-Wyle 変換することを考える。ここで、 $V(x, t)$ はポテンシャルエネルギーであり、状態 i として、エネルギー E_i における電子の状態は波動関数 ψ_i によって記述される。

ψ^* を ψ の複素共役として、様々な系に対して、密度行列は

$$\rho(x, x') = \sum_i \psi_i(x) \psi_i^*(x') \alpha_i \quad (2)$$

と表される。ここで、 α_i は状態 i が出現する確率である。また、 k はボルツマン定数、 T は温度であり、 $\beta = 1/kT$ である。よく知られているように、波動関数 ψ_i が Schrödinger 方程式を満足するなら、密度行列は次の Heisenberg 方程式を満足する:

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} (\Delta_x - \Delta_{x'}) \rho + (V(x) - V(x')) \rho. \quad (3)$$

このとき、Wigner 関数は rotated 密度行列の Fourier 変換として定義される:

$$f_w(r, p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \int \rho(r + \frac{1}{2}r', r - \frac{1}{2}r') e^{-\frac{ipr'}{\hbar}} dr'. \quad (4)$$

Heisenberg 方程式を $x = r + r'/2, x' = r - r'/2$ で変換し Fourier 変換すれば、電子の散乱過程 $Q(f_w)$ を考慮して、Wigner 関数は次の Wigner-Boltzmann 方程式を満足する:

$$\frac{\partial}{\partial t} f_w(r, p) + \frac{p}{m} \nabla_r f_w(r, p) - \theta[V] f_w = Q(f_w). \quad (5)$$

ここで $\theta[V]$ は擬微分作用素で、積分形として

$$\theta[V] f_w = \frac{i}{\hbar} \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \int \int \left(V(r + \frac{r'}{2}) - V(r - \frac{r'}{2}) \right) f_w(r, p) e^{-\frac{i(p-p')r'}{\hbar}} dp' dr \quad (6)$$

と表すことができる。ポテンシャルエネルギー関数が十分に滑らかであると仮定して、この項を Taylor 展開すれば、

$$\frac{\partial}{\partial t} f_w(r, p) + \frac{p}{m} \nabla_r f_w - \nabla_r V \cdot \nabla_p f_w - \sum_{\alpha=1}^{\infty} \frac{\hbar^{2\alpha} (-1)^\alpha}{4^\alpha (2\alpha + 1)!} (\nabla_r V \cdot \nabla_p f_w)^{2\alpha+1} = Q(f_w) \quad (7)$$

となるから、これより $\hbar \rightarrow 0$ のとき、

$$\theta[V]f_w \longrightarrow \nabla_r V \cdot \nabla_p f_w \quad (8)$$

となって、Wigner-Boltzmann 方程式は古典的 Boltzmann 方程式に漸近することがわかる。

3 量子流体方程式

Wigner 関数を用いると、様々な物理量 $A(p)$ の期待値

$$\langle A \rangle = \int A(p) f_w(r, p) dp \quad (9)$$

を定義することができる。粒子の速度を平均速度 u (macroscopic fluid velocity) と熱速度 p'/m で表し、

$$p = mu + p' \quad (10)$$

とすれば、電子密度、ストレステンソル、エネルギー密度はそれぞれ、

$$n \stackrel{\text{def}}{=} \langle 1 \rangle = \int f_w(r, p) dp, \quad (11)$$

$$P_{ij} \stackrel{\text{def}}{=} - \left\langle \frac{p'_i p'_j}{m} \right\rangle = - \int \frac{p'_i \cdot p'_j}{m} \cdot f_w(r, p) dp', \quad (12)$$

$$W \stackrel{\text{def}}{=} \left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle = \frac{1}{2} m n u^2 - \frac{1}{2} \text{Tr}(P_{ij}) \quad (13)$$

と表すことができる。量子流体方程式は Wigner-Boltzmann 方程式のマクロ表現を Chapman-Enskog 展開して導出される [5],[6]。Wigner-Boltzmann 方程式に物理量 $A = 1, p, p^2/2m$ をかけて、0次、1次、2次モーメントをとると、 $2\alpha + 1 \geq 3$ に注意すれば、2次モーメントまで (7) の左辺第4項はゼロとなる。このことから、散乱過程を古典的運動量緩和時間 τ_p とエネルギー緩和時間 τ_w で近似して、次の流体モデルが導出される:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{1}{m} \frac{\partial \Pi_i}{\partial x_i} = 0, \quad i = 1, 2, 3, \quad (14)$$

$$\frac{\partial \Pi_j}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (u_i \Pi_j - P_{ij}) = -n \frac{\partial V}{\partial x_j} - \frac{m n u_j}{\tau_p}, \quad (15)$$

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (u_i W - u_j P_{ij} + q_i) = -\frac{\Pi_i}{m} \frac{\partial V}{\partial x_i} - \frac{(W - W_0)}{\tau_w}. \quad (16)$$

ここで、 W_0 は熱平衡状態におけるエネルギー密度である。 n は電子密度、 u は電子の平均速度であり、

$$\Pi_i = m n u_i, \quad i = 1, 2, 3 \quad (17)$$

と定義する. q_i は熱流である.

量子流体モデルは, 局所的な熱平衡状態を仮定して Wigner 関数を求め, 電子密度, ストレステンソル, エネルギー密度の量子補正項を計算することによって導出される. 今, 系が非縮退ガスであると仮定し, Fermi-Dirac 統計の近似として Boltzmann 統計を適用する.

$$\rho(x, x') = \sum_i \psi_i(x) \psi_i^*(x') c e^{-\beta E_i} \quad (18)$$

ここで $\beta = 1/kT$ である. このとき, 熱平衡状態が満たすべき方程式は,

$$\frac{\partial}{\partial \beta} \rho(x, x') = \frac{\hbar^2}{4m} (\partial_x^2 \rho(x, x') + \partial_{x'}^2 \rho(x, x')) - \frac{1}{2} (V(x) + V(x')) \rho(x, x') \quad (19)$$

となり, Bloch 方程式と呼ばれている. f_{w_0} を熱平衡状態の Wigner 関数として, $x = r + r'/2$, $x' = r - r'/2$ と変換して (19) を Wigner-Weyle 変換すれば,

$$\frac{\partial}{\partial \beta} f_{w_0}(r, p) = \left(\frac{\hbar^2}{8m} \partial_r^2 - \frac{p^2}{2m} \right) f_{w_0}(r, p) - \int V_\beta(r, p - p') f_{w_0}(r, p') dp' \quad (20)$$

となる. ここで

$$V_\beta(r, p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \int \frac{1}{2} \left(V(r + \frac{r'}{2}) + V(r - \frac{r'}{2}) \right) e^{-\frac{ipr'}{\hbar}} dr' \quad (21)$$

である. (20) の右辺第 2 項を Taylor 展開すれば,

$$\frac{\partial}{\partial \beta} f_{w_0}(r, p) = \left(\frac{\hbar^2}{8m} \partial_r^2 - \frac{p^2}{2m} \right) f_{w_0}(r, p) - \sum_{\alpha=0}^{\infty} \frac{\hbar^{2\alpha} (-1)^\alpha}{(2\alpha)! 4^\alpha} \partial_r^{2\alpha} V(r) \partial_p^{2\alpha} f_{w_0} \quad (22)$$

となることがわかる. これから $\varepsilon = \hbar^2$ に関して, f_{w_0} を,

$$f_{w_0}(r, p) = \sum_{k=0}^{\infty} \varepsilon^k \phi_k(r, p) \quad (23)$$

と展開して, 熱平衡状態の Wigner 関数の近似解を計算することができる. 実際, (23) を (22) に代入して ε に対して各項を比較すれば, 熱平衡状態の 2 次オーダーまでの Wigner 関数の近似解は,

$$f_{w_0} \approx \phi_0 + \varepsilon \phi_1, \quad (24)$$

$$\phi_0 = A e^{-\beta(\frac{p^2}{2m} + V)}, \quad (25)$$

$$\phi_1 = A e^{-\beta(\frac{p^2}{2m} + V)} \cdot \frac{1}{8m} \left(-\beta^2 \partial_r^2 V + \frac{\beta^3}{3} \left((\partial_r V)^2 + \frac{p^2}{m} \partial_r^2 V \right) \right) \quad (26)$$

と求まる. よって, 熱平衡状態の Wigner 関数は,

$$f_{w_0}(r, p) \approx A e^{-\beta(\frac{p^2}{2m} + V)} \left(1 - \frac{\hbar^2 \beta^2}{8m} \left(\partial_r^2 V - \frac{\beta}{3} \left((\partial_r V)^2 + \frac{p^2}{m} \partial_r^2 V \right) \right) + O(\hbar^4) \right) \quad (27)$$

と求まり, これを成分で書けば,

$$f_{w_0}(r, p) = A e^{-\beta(\frac{p'^2}{2m} + V)} \left(1 + \hbar^2 \left(-\frac{\beta^2}{8m} \frac{\partial^2 V}{\partial x_k^2} + \frac{\beta^3}{24m} \left(\frac{\partial V}{\partial x_k} \right)^2 + \frac{\beta^3}{24m^2} p'_k p'_l \frac{\partial^2 V}{\partial x_k \partial x_l} \right) + O(\hbar^4) \right) \quad (28)$$

と表わされる. ここで, $k = 1, 2, 3$, $l = 1, 2, 3$ である. これを用いて, 電子密度, ストレステンソル, エネルギー密度を計算するとそれぞれ

$$n = C e^{-\beta V} \left(1 + \hbar^2 \left(-\frac{\beta^2}{12m} \frac{\partial^2 V}{\partial x_k^2} + \frac{\beta^3}{24m} \left(\frac{\partial V}{\partial x_k} \right)^2 \right) + O(\hbar^4) \right), \quad (29)$$

$$P_{ij} = -\frac{n}{\beta} \delta_{ij} - \frac{\hbar^2 \beta}{12m} n \frac{\partial^2 V}{\partial x_i \partial x_j} + O(\hbar^4), \quad (30)$$

$$W = \frac{1}{2} m n u^2 + \frac{3}{2} \frac{n}{\beta} + \hbar^2 \frac{\beta}{24m} n \frac{\partial^2 V}{\partial x_k^2} + O(\hbar^4) \quad (31)$$

と量子補正項を伴って評価することができる.

4 量子ドリフト-拡散方程式

今評価されたストレステンソル P_{ij} , エネルギー密度 W を (15), (16) に代入して量子流体方程式が導かれる. 特に, ストレステンソルを量子補正項を伴って評価すれば, (14), (15) は,

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (n u_i) = 0, \quad (32)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (m n u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(m n u_i u_j + k T n + \frac{\hbar^2 \beta}{12m} n \frac{\partial^2 V}{\partial x_i \partial x_j} \right) = -n \frac{\partial V}{\partial x_i} - \frac{m n u_i}{\tau_p} \quad (33)$$

となる. 今, β は一定として, (29) より, ポテンシャルエネルギーは次式で近似できる.

$$\frac{\partial}{\partial x_j} V = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial x_j} \log n + O(\hbar^2). \quad (34)$$

Ancona らはこの近似を用いて (33) における量子補正項を

$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2 \beta}{12m} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(n \frac{\partial^2 V}{\partial x_i \partial x_j} \right) &\approx -\frac{\hbar^2}{12m} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(n \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \ln(n) \right) \\ &= -\frac{\hbar^2 n}{6m} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{1}{\sqrt{n}} \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} \sqrt{n} \right) \end{aligned} \quad (35)$$

とモデル化した [5]. これによって, (33) は

$$\frac{\partial}{\partial t} (m n u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (m n u_i u_j + k T n) - \frac{\hbar^2}{6m} n \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{1}{\sqrt{n}} \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} \sqrt{n} \right) = -n \frac{\partial V}{\partial x_i} - \frac{m n u_i}{\tau_p} \quad (36)$$

と表わすことができる. ここで電流密度 $J_j = q n u_j$ であり, 電子に関しては $q = -e$ である. 量子ドリフト-拡散方程式はさらにいくつかの仮定を付加することによって導出される. まず, 運動エネルギーは熱エネルギーよりも小さいと仮定すれば, (36) は

$$\tau_p \frac{\partial}{\partial t} J_i + kT \frac{q\tau_p}{m} \frac{\partial n}{\partial x_i} - \frac{q\tau_p}{m} \frac{\hbar^2}{6m} n \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{1}{\sqrt{n}} \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} \sqrt{n} \right) = -\frac{q\tau_p}{m} n \frac{\partial V}{\partial x_i} - J_i \quad (37)$$

となる。ここで移動度を

$$\mu = \frac{e\tau_p}{m} \quad (38)$$

と定義すれば，Einstein の関係式より拡散係数は

$$D = \mu \frac{kT}{e} \quad (39)$$

となる。静電ポテンシャルを

$$V = -e\varphi \quad (40)$$

とし，電流の時間変化は運動量緩和時間よりも十分小さいとさらに仮定すると，電流密度は (37) より

$$J_i = eD \frac{\partial n}{\partial x_i} - e\mu n \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\varphi + \frac{\hbar^2}{6em} \frac{1}{\sqrt{n}} \frac{\partial^2 \sqrt{n}}{\partial x_j^2} \right) \quad (41)$$

と陽的に表わすことができる。これを (32) に代入すれば量子ドリフト 拡散方程式が導出される。

変数をスケールリングし， $\mu \equiv 1$ として，電子のふるまいのみを考えれば，次の量子ドリフト 拡散モデルをある有界領域 $\Omega \subset \mathbf{R}^d (d \geq 1)$ で考察することになる：

$$\lambda^2 \Delta \varphi = n - f, \quad (42)$$

$$\partial_t n + \operatorname{div} \left(n \nabla (\varphi - \ln(n) + b \frac{\Delta \rho}{\rho}) \right) = 0. \quad (43)$$

ここで $\rho = \sqrt{n}$ であり， $b = \hbar^2 / 6em$ である。 λ はデバイ長である。このモデルは，量子ポテンシャル $\gamma_n = b\Delta\rho/\rho$ によって古典的ドリフト-拡散 (DD) モデルを量子補正しており，DD モデルからの自然な拡張になっている。さらに，一般化された化学ポテンシャル (一般化擬フェルミレベル) を

$$v = \varphi - \ln(n) + b \frac{\Delta \rho}{\rho} \quad (44)$$

と導入すれば，4 階微分方程式を 2 つの 2 階微分方程式に分離することができる：

$$\lambda^2 \Delta \varphi = n - f, \quad (45)$$

$$\partial_t n + \operatorname{div}(n \nabla v) = 0, \quad (46)$$

$$b \frac{\Delta \rho}{\rho} - \ln(n) + \varphi = v. \quad (47)$$

この方程式系に対して，様々な変数の組をとることができるが，この場合，変数は (φ, v, ρ) であり，(47) においては ρ の正値性条件が必要となる [11]。さらに，実際の半導体素子の現象に対応して境界条件や初期条件を考察することによって，数学モデルとして量子ドリフト-拡散方程式の境界値問題や初期値境界値問題を設定することができる。

5 量子ドリフト-拡散方程式の定常解の存在と反復解法

古典的ドリフト-拡散 (DD) モデルは、今まで半導体素子設計に広く用いられており、数学解析や数値シミュレーションの観点から、定常解の存在と反復解法アルゴリズムの関連が議論されている [10]. 量子ドリフト-拡散 (QDD) モデルの場合、定常問題の弱解の存在証明は、熱平衡解に対する変分問題を基礎にして解析されてきた [11], [12]. 境界値問題の弱解の存在証明には不動点写像の構成が必要であるが、このことは QDD モデルの正値性を保証した反復解法アルゴリズムと関係付けられる [13].

定常解の境界値問題に対する仮定を次のように与える:

(A.1) $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, $d = 1, 2, 3$ は、区分的に滑らかな境界をもつ有界領域である.

(A.2) 境界 $\partial\Omega$ は $\partial\Omega_D$ で Dirichlet 条件を、 $\partial\Omega_N$ で Neumann 条件を与え、 $\partial\Omega \setminus (\partial\Omega_D \cup \partial\Omega_N)$ は測度ゼロ集合である.

(A.3) $H^1(\Omega) \hookrightarrow L^p(\Omega)$, $H^2(\Omega) \hookrightarrow W^{1,q}(\Omega)$ となるような $1/p + 1/q = 1/2$, $p, q \in (2, \infty]$ が存在する. ここで、任意の $\theta \in (0, 1)$ に対して、 $C > 0$ が存在して、 $a \in W^{1,q}(\Omega)$ で、 $\theta \leq a \leq 1/\theta$ ならば、任意の $g \in L^\infty(\Omega)$, $\psi_D \in W^{1,q}(\Omega)$ に対し、境界値問題

$$\operatorname{div}(a\nabla\psi) = g, \psi - \psi_D \in H_0^1(\Omega \cup \partial\Omega_N)$$

は弱解 $\psi \in W^{1,q}(\Omega)$ をもち、

$$\|\psi\|_{W^{1,q}(\Omega)} \leq C(\|\psi_D\|_{W^{1,q}(\Omega)} + \|g\|_{L^\infty(\Omega)})$$

を満足する.

(A.4) $(\varphi_D, v_D, u_D) \in (H^1(\Omega) \cap L^\infty(\Omega))^3$.

(A.5) $f \in L^\infty(\Omega)$.

定常な QDD 方程式は、 $\rho = \sqrt{n} = e^u$ の指数変換を用いて、(47) を同値の式に置き直し、

$$\lambda^2 \Delta \varphi = e^{2u} - f, \quad (48)$$

$$-b \nabla(\rho \nabla u) + \rho u = \frac{\rho}{2}(\varphi - v), \quad \text{in } \Omega \quad (49)$$

$$-\operatorname{div}(n \nabla v) = 0, \quad (50)$$

と書き直すことができる. 境界条件を

$$\varphi = \varphi_D, \quad u = u_D, \quad v = v_D, \text{ on } \partial\Omega_D, \quad (51)$$

$$\nabla \varphi \cdot \nu = \nabla u \cdot \nu = \nabla v \cdot \nu = 0, \text{ on } \partial\Omega_N \quad (52)$$

と与えて、変数の組 (φ, v, u) に対する QDD モデルの境界値問題を考察することができる. (49) においては、 $\rho = e^u$ の正値性は、 u の有界性によって保証されるので、 ρ の正値性を保証した反復解法アルゴリズムの構成において役立つ性質を提供する [14].

(48)-(50) をそれぞれ線形化して、変数の組 (φ, v, u) に対して不動点写像を次のように構成できる [13].

$w \in L^2(\Omega)$ が与えられたとして、

(P1) φ に関する境界条件に対して、

$$\lambda^2 \Delta \varphi = e^{2w} - f. \quad (53)$$

(P2) v に関する境界条件に対して,

$$-\operatorname{div}(e^{2w} \nabla v) = 0. \quad (54)$$

(P3) u に関する境界条件に対して,

$$-2b \nabla(e^w \nabla u) + 2e^w u = e^w(\varphi - v). \quad (55)$$

各線形問題 (P1) – (P3) は, Lax-Milgram 定理より一意解が存在し, $X = \{w \in L^2(\Omega) : -\underline{U} \leq w \leq \overline{U}\}$ に関して, 不動点写像 $T : X \rightarrow X$, $T(w) = u$ が構成される.

これに対して Stampacchia の補題と最大値原理によって次のアприオリ評価が成立し, 写像 T は連続でコンパクトであるので, Schauder の不動点定理により弱解の存在定理が証明される [13]:

補題 1 (アприオリ評価) $(\varphi, v, u) \in (H^1(\Omega) \cap L^\infty(\Omega))^3$ を境界値問題 (48)-(52) の弱解とする. このとき, Ω において, $-\underline{\varphi} \leq \varphi \leq \overline{\varphi}$, $-\underline{v} \leq v \leq \overline{v}$, $-\underline{U} \leq u \leq \overline{U}$ を満たす正数 $\underline{\varphi}, \overline{\varphi}, \underline{v}, \overline{v}, \underline{U}, \overline{U}$ が存在する.

定理 1 (弱解の存在) 境界条件 (51)-(52) を伴う境界値問題 (48)-(50) は $H^1(\Omega) \cap L^\infty(\Omega)$ において弱解が存在する.

さらに, 量子作用素 $A(\rho) = -\Delta \rho / \rho$ は単調であり [12], 系が熱平衡状態に十分近い状態にあるとき, 仮定 (A.3) の下に写像 T の縮小性が結論できる [13].

定理 2 (縮小写像) 境界値 $\|v_D\|_{W^{1,q}}$ が十分小さいとき, 写像 T は L_p ノルムに対して縮小である. ここで $1/p + 1/q = 1/2$.

QDD モデルの数学解析と反復解法アルゴリズムの構成とは密接に関連している. これらの解析結果は, ここで構成された不動点写像 T によって, QDD 方程式に対して ρ の正値性を保証した反復解法アルゴリズムを導くことができることを意味している.

6 数値スキーム

計算モデルを構成して数値シミュレーションを実現するためには, モデル方程式の離散化手法をさらに検討する必要がある. 各時刻を $\{t_k\}$, $k \in \mathbb{N}$ として, 時間ステップ $\tau_k = t_k - t_{k-1}$ とする. 時間に対して後退 Euler 法で差分化すると, 変数の組 (φ, n, u) に対して記述された非定常な QDD モデルの半離散化式を得る:

$$\frac{n^k - n^{k-1}}{\tau_k} - \operatorname{div}(\nabla n^k - n^k \nabla(\varphi^k + \gamma_n^k)) = 0, \quad (56)$$

$$-b \nabla(\rho^k \nabla u^k) + \rho^k u^k = \frac{\rho^k}{2}(\varphi^k - v^k), \quad (57)$$

$$\lambda^2 \Delta \varphi^k = n^k - f. \quad (58)$$

今, 初期データ $n(x, 0) = n_0(x)$ が与えられ, 印加電圧が無く, 境界条件が

$$\varphi^k = 0, \quad u^k = \varphi_b/2, \quad n^k = n_D, \quad \text{on } \partial\Omega \quad (59)$$

である場合，非定常な QDD モデルはエントロピー散逸系としての性質を保持して半離散化することができる．ここで， φ_b はビルトイン電圧である．実際，次の補題が成立し，この半離散化は Lyapunov 性を示すことがわかる：

補題 2(離散エントロピー(自由エネルギー)評価) エントロピー(自由エネルギー)を

$$W^k = \int_{\Omega} (b |\nabla \rho^k|^2 + (n^k (\ln n^k - 1) + 1) + \frac{\lambda^2}{2} |\nabla \varphi^k|^2) dx \quad (60)$$

とすれば，

$$W^{k+1} \leq W^k \quad (61)$$

となる．

このことは直接的計算によって直ちに導かれる [15]. QDD 方程式の空間離散化に対しては，古典的ドリフト-拡散モデルの場合と同じように高精度な保存スキームが提案されている [14]. Ω_i を領域 Ω を分割した計算セルとして， $\Omega = \cup_i \Omega_i$ ，とし， Ω_i 上で QDD 方程式 (49)-(50) の空間差分を考える．フラックスとして，

$$J = e^G \nabla \eta, \quad \eta = e^{-v} \quad (62)$$

ここで， $G = \varphi + b \nabla^2 \rho / \rho$ ，と

$$F = \rho \nabla u, \quad \rho = e^u \quad (63)$$

を考えれば，Tikhonov-Samarskii によって提案された保存スキーム [16] によって (49) と (50) は離散化できる．(49), (50) に対して Green の公式を適用して

$$\int_{\partial \Omega_i} n_t dx - \int_{\partial \Omega_i} e^G \frac{\partial \eta}{\partial \nu} ds = 0, \quad (64)$$

$$-b \int_{\partial \Omega_i} \rho \frac{\partial u}{\partial \nu} ds + \int_{\Omega_i} \rho u dx + \frac{1}{2} \int_{\Omega_i} \rho (\varphi - v) dx \quad (65)$$

となる．簡単のために一次元において記述すれば，

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} n_t dx = J_{i+1/2} - J_{i-1/2}, \quad (66)$$

$$b(F_{i+1/2} - F_{i-1/2}) - u_i \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \rho dx = -\frac{1}{2} (\varphi_i - v_i) \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \rho dx \quad (67)$$

と書ける．区間 $[x_i, x_{i+1}]$ 上で F, J を積分して，計算セル界面において数値フラックスを

$$F_{i+1/2} \text{ or } J_{i+1/2} = \frac{\eta_{i+1} - \eta_i}{\int_{x_i}^{x_{i+1}} e^{-\theta} dx}, \quad \theta = G \text{ or } u \quad (68)$$

と近似し，(66), (67) に代入すれば，保存スキームのあるクラスが構成できる．ここで重要なことは， $\int_{x_i}^{x_{i+1}} e^{-\theta} dx$ の陽的積分である．この陽的積分に対して， θ を区分的に定数であると仮定すれば，陽的積分は

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} e^{-\theta} dx = \frac{h_{i+1}}{e^{\frac{\theta_{i+1} + \theta_i}{2}}} \quad (69)$$

となって, (69) を (68) に代入すれば, 低精度非線形スキームが得られる. 被積分関数が指数関数の場合, θ を区分的に線形であると仮定して陽的積分を求めることができ, 高精度スキームを構成することができる. この手法はその近似手法から指数法と呼ばれ, 陽的積分は,

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} e^{-\theta} dx = \frac{h_{i+1} e^{-\theta_{i+1}}}{B(\theta_{i+1} - \theta_i)} \quad (70)$$

で与えられる. ここで, $B(\cdot)$ は Bernoulli 関数である. この陽的積分を用いて数値フラックスはそれぞれ,

$$J_{i+1/2} = \frac{1}{h_{i+1}} (B(G_{i+1} - G_i) n_{i+1} - B(G_i - G_{i+1}) n_i), \quad (71)$$

$$F_{i+1/2} = \frac{1}{h_{i+1}} e^{u_{i+1}} B(u_{i+1} - u_i) (u_{i+1} - u_i) \quad (72)$$

となり, QDD 方程式に対する以下のような非線形高精度差分スキームを構成することができる:

$$\begin{aligned} & \frac{n^k - n^{k-1}}{\tau_k} \\ &= \frac{B(G_{i+1}^k - G_i^k) n_{i+1}^k - (B(G_i^k - G_{i+1}^k) + B(G_i^k - G_{i-1}^k)) n_i^k + B(G_{i-1}^k - G_i^k) n_{i-1}^k}{h^2} \\ & \quad - \frac{b(\rho_{i+1}^k B(u_{i+1}^k - u_i^k) (u_{i+1}^k - u_i^k) - \rho_i^k B(u_i^k - u_{i-1}^k) (u_i^k - u_{i-1}^k))}{h^2} + \Lambda_i^k u_i^k \\ &= \frac{\Lambda_i^k}{2} (\varphi_i^k - v_i^k). \end{aligned} \quad (74)$$

ここで, $\Lambda_i = \int_{x_i}^{x_{i+1}} \rho dx$ である. この非線形スキームは, Tikhonov-Samarskii によって提案された保存スキームのクラスにおいて, 指数法によって高精度化をはかった高精度保存スキームといえる. このため, 粗い格子上でも Boltzmann 統計に従うキャリア密度の計算が可能である. このような高精度保存スキームは, 古典的 DD モデル, すなわち, $G = \varphi$ の場合に対して, 当時 Bell 研究所にいた電子工学者 Scharfetter と Gummel によって考案され, Scharfetter-Gummel スキームと呼ばれている [17]. このような高精度スキームはキャリア密度がポテンシャルの指数関数としてふるまう輸送現象のシミュレーションにおいて効果的であり, この研究を端緒にして半導体シミュレーションが大きく前進し, 数値シミュレーションによる半導体素子の CAD が実現した.

7 まとめ

半導体における電子輸送モデリングの分野を取り上げ, 数学とシミュレーションの関わりについて, 物理モデルや数学モデルと計算モデルとの関連を軸に最近の諸結果から概観した. 電子輸送モデルの構築のために, Schrödinger 方程式から導出される量子流体方程式の研究が進んでいる. 量子ドリフト-拡散方程式はそのモデル階層の一つであるが, この方程式の数学解析と計算モデルの構成とは密接な関係にあり, 正值性を保証した反復解法アルゴリズムや高精度スキームの研究が進められている. さらに, この分野では, 量子閉じ込め輸送シミュレーションへの適用を目指して高解像度スキームの必

要性も議論されている [18]. 半導体分野に限らず新たに進展している科学技術分野において, 数学モデルと計算モデルとの関連を数学的手法によって統一的に考察して, 数値シミュレーションを実現していくことが益々重要になってくると考えられる.

文 献

- [1] T.Grasser, T-W.Tang, H.Kosina, S.Selberherr, A review of hydrodynamic and energy-transport models for semiconductor device simulation, IEEE Proc., 91(2003), 251-274.
- [2] S.Kotani, Ljapunov indices determine absolutely continuous spectra of stationary random one-dimensional Schrödinger operators, Proc. of Taniguchi Symp. SA. Katata(1982),225-247.
- [3] 小谷眞一, ランダム・ポテンシャルの問題, 数学,38(1986),53-61.
- [4] 小谷眞一, ランダム・ポテンシャルの問題 II, 数学,40(1986),193-201.
- [5] M.G.Ancona and G.J.Iafrate, Quantum correction to the equation of state of an electron gas in a semiconductor, Phys.Rev.B, 39(1989), 9536-9540.
- [6] C.L.Gardner, The quantum hydrodynamic model for semiconductor devices, SIAM J. Appl.Math., 54(1994), 409-427.
- [7] D.Bohm, A suggested interpretation of the quantum theory in terms of 'hidden variables'I, Phys.Rev., 85(1952),166-179.
- [8] D.Bohm, A suggested interpretation of the quantum theory in terms of 'hidden variables'II, Phys.Rev., 85(1952),180-193.
- [9] R.E.Wyatt, Quantum dynamics with trajectories: Introduction to quantum hydrodynamics, Springer,(2005).
- [10] J.W.Jerome, Analysis of charge transport, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, (1996).
- [11] R.Pinna and A.Unterreiter, The stationary current-voltage characteristics of the quantum drift-diffusion model, SIAM J.Numer.Anal., 37(1999), 211-245.
- [12] A.Unterreiter, The thermal equilibrium solution of a generic bipolar quantum hydrodynamic model, Comm. Math. Phys., 188(1997), 69-88.
- [13] S.Odanaka, A numerical scheme for quantum hydrodynamics in a semiconductor, RIMS Kokyuroku, Kyoto University,1495(2006), 51-59.
- [14] S.Odanaka, Multidimensional discretization of the stationary quantum drift-diffusion model for ultrasmall MOSFET structures, IEEE Trans. CAD of ICAS, 23(2004), 837-842.
- [15] S.Gallego and F.Méhats, Entropic discretization of a quantum drift-diffusion model, SIAM J. Numer.Anal., 43(2005), 1828-1849.
- [16] G.I.Maruchuk, Methods of numerical mathematics, Springer-Verlag, (1982).
- [17] D.L.Scharfetter and H.K.Gummel, Large signal analysis of a silicon Read diode oscillator, IEEE Trans. Elec. Dev., 16(1969), 64-77.
- [18] S.Odanaka, A high-resolution method for quantum confinement transport simulations in MOSFETs, IEEE Trans. CAD of ICAS, 26(2007), 80-85.

(2007 年 5 月 9 日提出)

(おだなか しんじ・大阪大学サイバーメディアセンター)