

電力素子開発への数値計算の応用

中 川 明 夫
倉 田 衛

東京芝浦電気(株)総合研究所電子部品研究所

1. ま え が き

半導体素子の数値計算モデルは、半導体素子内の電子と正孔の連続方程式とポアソン方程式をまとめて解くことにより、電子、正孔の挙動を求め、素子の電圧電流特性を含めた諸特性を計算するもので、1969年のScharfetter氏とGummel氏の論文⁽¹⁾に端を発している。この数値計算モデルは素子設計の上で非常に有用であることが明らかになるにつれて、近年著しい発展をみせてきた。電力用半導体素子の場合には集積回路と異なり、素子単体の設計に力点がおかれるためモデルとして扱いやすい反面、動作電圧が高いことや高注入の場合を扱う必要があることなど電力用素子特有の問題がある。本解説では数値計算上の基礎知識と二、三の応用例を示し、モデリングに興味のある読者のための一助となることを目的としたものである。

まず、数値計算の基礎を解説する前に、電子、正孔のフェルミ準位と電位の間の関係を図1に示す。この関係は以下断わりなく使われる。また、第2・2、2・3節は基本形の拡張に関する部分なのでとばして読まれて差し支えない。

2. 半導体素子モデル

2.1 基本方程式

半導体素子を解析する場合に基本となる方程式はポアソン方程式、電流の式、連続の式である⁽²⁾。

$$\text{div}(\epsilon \cdot \text{grad } \phi) = -q(N_D - N_A + p - n) \dots\dots\dots (1)$$

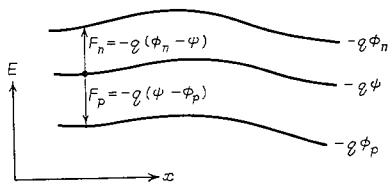


図1 電子、正孔のフェルミ準位 ϕ_n , ϕ_p , F_n , F_p と電位の関係を示す図

$$\mathbf{J}_p = -q D_p \text{grad } p - q \mu_p p \text{grad } \phi \dots (2)$$

$$\mathbf{J}_n = q D_n \text{grad } n - q \mu_n n \text{grad } \phi \dots\dots (3)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{q} \text{div } \mathbf{J}_p + G_p - U_p \dots\dots\dots (4)$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q} \text{div } \mathbf{J}_n + G_n - U_n \dots\dots\dots (5)$$

ここで、 q : 素電荷、 p , n : 正孔、電子密度、 ϕ : 電位、 D_p , D_n : 正孔、電子の拡散定数、 μ_p , μ_n : 正孔、電子の移動度、 N_D , N_A : ドナー、アクセプタ不純物濃度、 ϵ : 半導体の誘電率、 G_p , G_n : 単位時間あたりの正孔、電子の発生率、 U_p , U_n : 同消滅率、 \mathbf{J}_p , \mathbf{J}_n : 正孔、電子の電流密度ベクトル

今、キャリア密度 p , n のエネルギー分布がボルツマン分布⁽²⁾

$$p = n_{i0} \exp[q(\phi_p - f_i)/kT] \dots\dots\dots (6)$$

$$n = n_{i0} \exp[q(f_i - \phi_n)/kT] \dots\dots\dots (7)$$

但し f_i : 真性半導体のフェルミ準位、

n_{i0} : 真性半導体のキャリア密度

で表わされるとすると、次のアインシュタインの関係式⁽²⁾が成立する。

$$qD = \mu kT \dots\dots\dots (8)$$

ϕ を f_i の位置に選び(6), (7), (8)式を用いると電流の式は次のようになる。

$$\mathbf{J}_p = -q \mu_p p \text{grad } \phi_p \dots\dots\dots (9)$$

$$\mathbf{J}_n = -q \mu_n n \text{grad } \phi_n \dots\dots\dots (10)$$

この関係式はキャリアの分布がフェルミ統計に従うとした場合でも成立する⁽³⁾。但し、この場合には(8)式は次のように変更される(正孔の場合)。

$$qD_p/\mu_p = p/(\partial p/\partial F_p) \dots\dots\dots (11)$$

F_p : 正孔のフェルミエネルギー

基本変量を p , n , ϕ に選べば、解くべき方程式は(1), (2), (3), (4), (5)であり、これ以外の式は初期の試行値を与えるとき以外は用いない。

実際にこれらの式を解く場合には μ, G, U の値を与える必要がある。移動度 μ については実験結果に基づいて不純物との散乱, キャリア同士の散乱や高電界の場合のキャリア速度の飽和を考慮した経験式⁽⁴⁾を用いるのが簡便である。キャリアの消滅の項 U では禁制帯内にエネルギー準位をもつ再結合中心を介したSRH (Shockley-Read-Hall) 形の電子, 正孔の再結合を通常は考慮すればよい⁽²⁾。

$$U_{SRH} = \frac{pn - n_i^2}{\tau_p \left(n + n_i \exp\left(\frac{E_t - E_i}{kT}\right) \right) + \tau_n \left(p + n_i \exp\left(\frac{E_i - E_t}{kT}\right) \right)} \dots\dots\dots (12)$$

E_t : 再結合中心のエネルギー準位,

E_i : 真性半導体のフェルミエネルギー

キャリア密度が 10^{17} cm^{-3} 程度に高い場合には, これに加えて第三のキャリアのエネルギー変化を伴って電子正孔が直接再結合する次のオーグジュ再結合⁽⁴⁾を含める必要がある。

$$U_{Auger} = (\gamma_e n + \gamma_h p)(pn - n_i^2) \dots\dots\dots (13)$$

γ_e, γ_h : $1 \sim 2 \times 10^{-31} \text{ cm}^{-6}/\text{s}$

全体の U の値は

$$U_n = U_p = U_{SRH} + U_{Auger} \dots\dots\dots (14)$$

としてよい場合が多い。 n_{i0} の値はシリコンの場合次の実験式がある。

$$n_{i0} = 3.88 \times 10^{16} T^{3/2} \exp(-7,000/T) \text{ cm}^{-3} \dots\dots\dots (15)$$

キャリアの発生項 G は高電界中での衝撃イオン化を考慮すれば次の実験式がある⁽²⁾。

$$G = (1/q)(\alpha_n |J_n| + \alpha_p |J_p|) \dots\dots\dots (16)$$

$$\alpha_n, \alpha_p = A \exp[-(B/|E|)^m] \dots\dots\dots (17)$$

これらの方程式はすべての素子に共通して用いることができ, トランジスタやサイリスタといった素子の種別は不純物濃度 N_D, N_A の形が異なっていることよって表わされる。それぞれの特性の違いは計算の結果自動的に与えられる。

2.2 禁制帯幅が空間的に変化する場合とフェルミ統計を用いる場合への拡張⁽⁵⁾

実際の素子特性を計算する場合には前節の定式化では不完全な場合が多い。例えば, シリコンの場合では不純物濃度が 10^{18} cm^{-3} を越えると, 不純物の作る準位の数が伝導帯や価電子帯の実効の状態密度に比べて無視できなくなり, かなりの数の電子や正孔が不純物準位に存在するようになる。この不純物準位が伝導に寄与するか否かにかかわらず禁制帯内にこのように大

きな不純物の準位が存在することは, 結果として少数キャリア密度を大きく変えてしまうことになるので, トランジスタなどのバイポーラ素子ではその特性に大きく影響する。一方, この現象は不純物帯があるためではなく, 実際に禁制帯幅が変化していると考える理論⁽⁶⁾もあるが, いずれの理論をとるにしても, バンド構造が空間的に変化している場合への基本方程式の拡張が必要になる。この節では, キャリア密度が 10^{19} cm^{-3} を越えたときに重要になるフェルミ統計の効果をも含めて一般的な場合への拡張を扱う⁽⁵⁾。

まず, フェルミ統計下でも正しい電流の式 (9), (10) から出発する。電子, 正孔の密度は状態密度関数 ρ を用いて次のように書ける。

$$p = \int \frac{\rho_p(E) dE}{1 + \exp\left(\frac{E - F_p}{kT}\right)} \dots\dots\dots (18)$$

$$n = \int \frac{\rho_n(E) dE}{1 + \exp\left(\frac{E - F_n}{kT}\right)} \dots\dots\dots (19)$$

電位 ψ を決定する (1) 式と連続の (4), (5) 式は不変である。但し, この場合もはや ψ と f_i とは常に一致させることはできない。そこで前節の結果の自然な拡張として標準となる半導体の部分 (例えば不純物のない部分) で ψ と f_i が一致するように選ぶのがよい。さて, 基本方程式は (1), (4), (5), (9), (10) (18), (19) 式となるが, これを解くことは簡単ではない。そこで通常の計算プログラムが使えるように次のような技巧を用いる。まず二つの変量 ω_n, ω_p を導入して (18), (19) 式を次のように書き換える⁽⁵⁾。

$$p \equiv n_0 \exp(1/kT)(F_p + q\omega_p) \dots\dots\dots (20)$$

$$n \equiv n_0 \exp(1/kT)(F_n + q\omega_n) \dots\dots\dots (21)$$

n_0 は適当な定数

これらを用いると電流の式 (9), (10) 式は

$$J_p = -\mu_p kT \text{ grad } p - q \mu_p p \text{ grad}(\psi + \omega_p) \dots\dots\dots (22)$$

$$J_n = \mu_n kT \text{ grad } n - q \mu_n n \text{ grad}(\psi + \omega_n) \dots\dots\dots (23)$$

となる。あるいは, ω_n, ω_p の代わりに

$$n_i = n_0 \exp[(q/2kT)(\omega_n + \omega_n)] \\ = p \cdot n \exp[-(q/kT)(F_n + F_p)] \dots (24)$$

$$\omega = \frac{1}{2}(\omega_n - \omega_p) = \frac{kT}{q} \ln\left(\frac{n}{p}\right) - \frac{F_n - F_p}{2q} \dots\dots\dots (25)$$

なる変量 n_i, ω を導入すれば電流の式は

$$J_p = -\mu_p kT \text{grad } p - q \mu_p p \text{grad} \left(\psi + \omega - \frac{kT}{q} \ln \frac{n_i}{n_0} \right) \dots (26)$$

$$J_n = \mu_n kT \text{grad } n - q \mu_n n \text{grad} \left(\psi + \omega + \frac{kT}{q} \ln \frac{n_i}{n_0} \right) \dots (27)$$

の形となる。このとき p, n は次のように表わされる。

$$p = n_i \exp(q/kT)(\phi_p - \psi - \omega) \dots (28)$$

$$n = n_i \exp(q/kT)(\psi + \omega - \phi_n) \dots (29)$$

さて、 ω_n, ω_p または n_i, ω は多くの場合位置だけの関数と近似できるので、一連の基本方程式(1), (4), (5), (26), (27)式は 2・1 節の場合と同様となり、同じ計算プログラムを用いて解くことができる。

次に変量 ω_n, ω_p の意味を簡単な場合について考えてみる。

(1) ボルツマン統計が成立し、伝導帯や価電子帯の状態密度関数の形は不変で、そのバンド端の位置のみが変化する場合には、 ω_n, ω_p はそれぞれ伝導帯端や価電子帯端のエネルギーの変化を表わす。

(2) バンド構造は変化せず、フェルミ統計だけを考慮した場合には、 ω_n, ω_p はフェルミ統計関数のボルツマン統計関数からのずれの程度を表わし、フェルミ準位の関数となる。いいかえれば、 ω_n, ω_p を導入することで、扱っている系があたかもボルツマン統計に従うとして扱えることになる。シリコンの場合、キャリア密度が 10^{19} cm^{-3} を越えるとフェルミ統計の効果が大きくなり、禁制帯幅が広がったことと等価の効果とを及ぼす。

別の二つの変量 n_i, ω は今までの伝統的な定式化に対応した選び方で、 n_i^2 は電子正孔密度積に対応し、 ω は電子と正孔のエネルギー分布の非対称性を表わしている。 n_i, ω を用いると次のような利点がある。第一に、 $\psi + \omega$ を新しい電位 χ と考えることができるだけでなく、多くの場合 ω を無視できる。すなわち、 χ を用いると ω はポアソン方程式だけに表われる。

$$\text{div}(\epsilon \cdot \text{grad } \chi) = -q(N_D - N_A + p - n) + \text{div}(\epsilon \cdot \text{grad } \omega)$$

これはあたかも $\text{div}(\epsilon \cdot \text{grad } \omega)$ の電荷があることになるが、通常、この絶対値は小さいので実際の電荷に対して無視できる。第二に、実効的不純物濃度 $|N_D - N_A|/n_i^2$ の概念を導入して近似的議論ができること⁽⁷⁾である。

さて、実際に n_i, ω を求める場合には電子親和力や禁制帯幅の情報を基に伝導帯や価電子帯が標準となる半導体と比べてどのように変化しているかを求め、これから ψ の位置を決定し (18), (19), (24), (25)式か

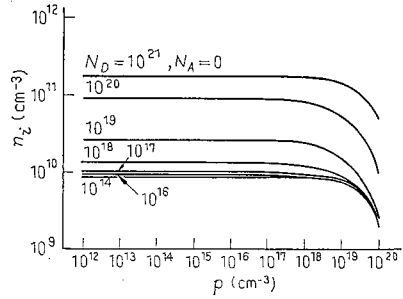


図 2 中性領域 ($N_A=0, n=N_D+p$) の電子正孔密度積 n_i^2 の少数キャリア密度に対する変化⁽⁵⁾

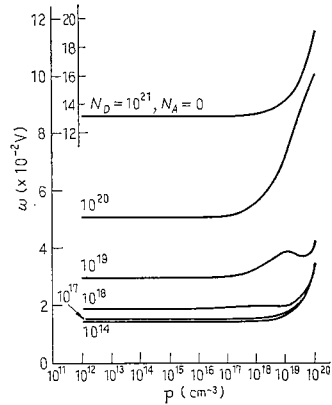


図 3 接合領域 ($N_A=N_D, n=p$) の電子正孔密度積 n_i^2 のキャリア密度に対する変化⁽⁵⁾

ら n_i, ω を定めることになる。図 2, 3 にはシリコンの場合について n_i, ω の値を不純物濃度 N_D, N_A と少数キャリア密度 p の関数として示してある⁽⁵⁾。この計算例から不純物濃度が 10^{18} cm^{-3} を超えると n_i は増大し、また少数キャリア密度が 10^{19} cm^{-3} を超えるとフェルミ統計の効果で減少する様子がわかる。

2.3 温度変化を含める場合⁽⁸⁾

パワー半導体素子では当然のことながら大電力を扱うため熱損失が大きく、素子温度が上昇するとともに素子内に温度傾斜が生じる。温度が上昇すると移動度が低下し、温度傾斜による電流も流れる⁽³⁾。注意しなければならないことは、電流の式(26), (27)式はもはや全く正しくないことで、ボルツマンの輸送方程式から出発しなければならない。詳しい説明は省略するが自由電子近似を行ない、ボルツマン統計が成立するとすると電流の式は次のようになる⁽⁸⁾。

$$J_n = \mu_n kT \frac{\partial n}{\partial x} - \mu_n kT n \frac{\partial}{\partial x} (\ln N_v) - q \mu_n n \frac{\partial \phi_c}{\partial x} + \mu_{2n} k n \frac{\partial T}{\partial x} \dots (30)$$

$$\mu_{2n} = -\frac{q}{(m_e^*)^2 kT} \frac{\int \tau p_x^2 E \frac{\partial f_0}{\partial E} d^3 p}{\int f_0 d^3 p} \dots (31)$$

ここで、 N_0 は伝導帯の実効的状态密度、 $-q\varphi_c$ は伝導帯の下端のエネルギー、 f_0 は熱平衡時の分布関数、 m_e^* は実効的質量を表わす。緩和時間 τ について音響形フォノンの散乱のみを考慮する場合には μ_{2n} は $2\mu_n$ と等しくなる。

一方、素子内部の温度の分布を求める式は次のようになる。

$$\rho C \frac{\partial T}{\partial t} = Q + \text{div} \left(K \frac{\partial T}{\partial x} \right) \dots (32)$$

$$Q = -q(\varphi_c - \varphi_v)(U - G) - J_n \text{grad} \varphi_c - J_p \text{grad} \varphi_v \dots (33)$$

ここで、 ρ は密度、 C は比熱、 Q は発熱量、 K は熱伝導率である。実際の計算を行なう場合には、更に移動度やキャリア寿命などの温度依存性を含める必要がある。

2.4 基本方程式の数値解法⁽⁹⁾

基本方程式を数値的に解く方法は主に差分法と有限要素法があるが、ここではメモリー容量が節約できる反復法に適した差分法を取りあげる。

まず基本方程式を差分方程式に直す必要がある。簡単のために結果が一次元の場合について示す。二次元の場合も全く同様である。図4の分割点(格子)を用い、安定した解の求められる後退差分形を採用すると分割点 N について次のような差分方程式が得られる。

$$\frac{p(N) - p_0(N)}{k_t} = -\frac{1}{q} \left(\frac{J_p(M) - J_p(M-1)}{k(N)} \right) + G(N) - U(N) \dots (34)$$

$$\frac{n(N) - n_0(N)}{k_t} = \frac{1}{q} \left(\frac{J_n(M) - J_n(M-1)}{k(N)} \right) + G(N) - U(N) \dots (35)$$

$$J_p(M) = \frac{q}{h(M)} [A_p(M)p(N) + B_p(M)p(N+1)] \dots (36)$$

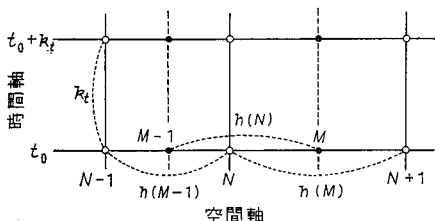


図4 時空間における格子点

$$J_n(M) = \frac{q}{h(M)} [A_n(M)n(N) + B_n(M)n(N+1)] \dots (37)$$

$$\begin{aligned} \gamma_1(N)\psi(N-1) + \gamma_2(N)\psi(N) + \gamma_3(N)\psi(N+1) \\ = -q[N_D(N) - N_A(N) + p(N) - n(N)] \dots (38) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} A_p(M) &= \frac{kT}{q} \frac{\mu_p(M)\beta_p(M)}{1 - \exp[-\beta_p(M)]} \\ B_p(M) &= \frac{kT}{q} \frac{\mu_p(M)\beta_p(M)}{1 - \exp[\beta_p(M)]} \\ A_n(M) &= \frac{kT}{q} \frac{\mu_n(M)\beta_n(M)}{1 - \exp[\beta_n(M)]} \\ B_n(M) &= \frac{kT}{q} \frac{\mu_n(M)\beta_n(M)}{1 - \exp[-\beta_n(M)]} \end{aligned} \dots (39)$$

$$\begin{aligned} \beta_p(N) &= q[\psi(N) + \omega_p(N) - \psi(N) - \omega_p(N)]/kT \\ \beta_n(N) &= q[\psi(N) + \omega_n(N) - \psi(N) - \omega_n(N)]/kT \\ \gamma_1(N) &= \frac{\varepsilon(M-1)}{h(M-1)h(N)} \\ \gamma_2(N) &= -\frac{1}{h(N)} \left[\frac{\varepsilon(M-1)}{h(M-1)} + \frac{\varepsilon(M)}{h(M)} \right] \dots (40) \\ \gamma_3(N) &= \frac{\varepsilon(M)}{h(M)h(N)} \end{aligned}$$

(36)、(37)式は安定した解を得るために(22)、(23)式を一度積分したものをを用いている。

これらの差分方程式は p 、 n 、 ψ について非線形であるからこれは解くためにはニュートンの反復法を用いる。まず近似の悪い解 $p_1(N)$ 、 $n_1(N)$ 、 $\psi_1(N)$ がわかっているとき、真の解を $p_1(N) + \delta p(N)$ 、 $n_1(N) + \delta n(N)$ 、 $\psi_1(N) + \delta \psi(N)$ とすれば、これは解くべき方程式 $f=0$ を満たすはずである。

$$\left. \begin{aligned} f(p_1(N) + \delta p(N), n_1(N) + \delta n(N), \\ \psi_1(N) + \delta \psi(N), \dots) = 0 \end{aligned} \right\} \dots (41)$$

δp 、 δn 、 $\delta \psi$ が小さいとしてテーラー展開し、一次の項だけをとれば次のようになる。

$$\begin{aligned} f + \frac{\partial f}{\partial p(N)} \delta p(N) + \frac{\partial f}{\partial n(N)} \delta n(N) \\ + \frac{\partial f}{\partial \psi(N)} \delta \psi(N) + \dots = 0 \dots (42) \end{aligned}$$

一般には一次元の場合、次の形の式が未知数の数だけ得られる。

$$\begin{aligned}
 &A_i(N)\delta p(N-1)+B_i(N)\delta p(N) \\
 &+C_i(N)\delta p(N+1)+D_i(N)\delta n(N-1) \\
 &+E_i(N)\delta n(N)+F_i(N)\delta n(N+1) \\
 &+G_i(N)\delta \phi(N-1)+H_i(N)\delta \phi(N) \\
 &+J_i(N)\delta \phi(N+1)=R_i(N) \dots\dots\dots (43) \\
 &\{N=1, 2, \dots (\text{格子点の数}), i=1, 2, 3\}
 \end{aligned}$$

この多元一次連立方程式を解いて $\delta p, \delta n, \delta \phi$ を求めれば、 $p_i(N)+\delta p(N), n_i(N)+\delta n(N), \phi_i(N)+\delta \phi(N)$ はより真の値に近いと考えられるので、再びこの値を用いて同様のプロセスを繰返せば、ついには真の値に十分近い解が得られることになる。

次に、最近では二次元の問題を扱う機会が多くなっているため、以下二次元の場合を考えることにする。二次元の場合には中心となる格子点とその前後左右の点に対応した未知数 $\delta p, \delta n, \delta \phi$ 、計 15 個が (43) 式中に現われる。(43) 式を行列式の形に書けば

$$\begin{bmatrix}
 \delta p(1) \\
 \delta n(1) \\
 \delta \phi(1) \\
 \vdots \\
 \delta p(N) \\
 \delta n(N) \\
 \delta \phi(N)
 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix}
 R_1(1) \\
 R_2(1) \\
 R_3(1) \\
 \vdots \\
 R_1(N) \\
 R_2(N) \\
 R_3(N) \\
 \vdots
 \end{bmatrix} \dots\dots\dots (44)$$

となる。但し斜線は非ゼロ要素を表わす。

二次元格子 (K 行 L 列) の番号づけは、 i 行 j 列の格子が $N=(j-1)K+i$ (但し $K < L$) として扱う。一次元の場合には、0 でない要素は対角項の前後 9 本だけなので、ガウスの消去法を用いて容易に上または下三角行列が得られ解が求まる。二次元の場合には、ガウスの消去法などの直接法はメモリー容量が莫大になり通常適用できない。そこで再び反復法を用いることになる。注意すべきことは二つの反復過程があることで、一つは非線形方程式を解くためのニュートン法の反復、もう一つは各ニュートン法の反復過程で多元一次方程式を解くための反復法であり、主なものに SLOR⁽¹⁰⁾、ICCG⁽¹¹⁾、Stone⁽¹²⁾ 法などがある。

基本方程式を解くにあたって未知変量として p, n の代りにフェルミ準位 ϕ_p, ϕ_n を用いるとよい場合がある。これは (39) 式の係数行列の各要素が概略同じオーダーの値になるため、 10^{+38} までしか扱えない計算機では良い方法である。しかし、各ニュートンステップ内では次の関係があり、 p, n は定数であるから互いに線形変換である。

$$\delta p = \frac{q}{kT} p (\delta \phi_p - \delta \phi) \dots\dots\dots (45)$$

$$\delta n = \frac{q}{kT} n (\delta \phi - \delta \phi_n) \dots\dots\dots (46)$$

ところが、補正を $p+\delta p$ で行なう場合と $\phi_p+\delta \phi_p$ で行なう場合とでは補正結果が異なる。なぜならば後者での補正では新しい正孔密度 p' は

$$p' = p \exp \frac{q}{kT} (\delta \phi_p - \delta \phi) = p \exp \frac{\delta p}{p} \dots\dots\dots (47)$$

となり、 $p+\delta p$ とは一致しない。もちろん収束すれば結果は同じになるが、留意すべき点である。

次に境界条件について述べよう。よく用いられる条件はオーミック電極、酸化膜との境界および対称の条件である。オーミック電極では通常キャリアの再結合が無限大であるとして、キャリア密度は常に熱平衡のものと同じとする。すなわち、

$$\left. \begin{aligned}
 &p(1)=p_0(1), n(1)=n_0(1), \phi(1)=\phi_0(1) \\
 &p(L)=p_0(L), n(L)=n_0(L), \\
 &\phi(L)=\phi_0(L)+V_{AP} \\
 &\dots\dots\dots (48)
 \end{aligned} \right\}$$

である。この条件は格子点 1 でフェルミ準位が 0、格子点 L で V_{AP} となり、2 電極間に電圧 V_{AP} が印加されている場合を表わしている。酸化膜との境界は正確に扱おうとすると大変であるが、簡単な方法は次に述べる対称の条件を用いてしまうことである。これはキャリアの注入があるバイポーラ素子では、表面に電荷があってもキャリアによるスクリーニングが起るので特性への影響が少ないと思われるからである。

さて、対称の条件とは、そこで素子が終わっているのではなく鏡面对称の関係にあるように連続していることを意味している。この場合には一連の方程式から片側の変数を消去することができ、片方の部分だけで方程式を完結できる。

今までは正孔、電子、電位の三つの方程式を連立させて解く場合を述べてきたが、FET のようなユニポーラ素子では伝導に寄与しないキャリアの方程式は無視して扱うことができる。また、この場合にはポアソン方程式とキャリアの方程式を別々に解くガンメルの方法⁽¹³⁾も有効である場合が多い。しかし、一般には三つの方程式を解かねばならない場合が多く、連立して解いた方が結局は収束が早い。現在の数値解法上の問題点は (44) 式を解く有力な反復解法がないことである。これに対して直接法はいつでも安定して解が得られるが多くのメモリーと長い計算時間を必要とする。

3. 電力用半導体素子への応用

3.1 逆電圧の数値計算

電力用半導体素子の一つの重要な設計項目は pn 接合の逆電圧であるが、これは数値計算モデルの最も好適な応用の一つである。その理由はポアソン方程式だけを解けばよく、その解は容易に求まるためである。但し、ポアソン方程式を解く際に、連続方程式をも含めて解いたときと比べて大幅に異なるように空乏層の領域を矛盾なく決める必要がある。この最も簡単な方法は多数キャリアのフェルミ準位を近くにある電極の値とし、少数キャリアのそれは適当な値に固定してしまう方法である⁽¹⁴⁾。例えば図5のダイオードの例では素子全体にわたって正孔のフェルミ準位を0とし電子の準位を V_{AP} とおくことができる。これは、逆電流が小さいので多数キャリアのフェルミ準位は一定であり、しかも少数キャリア密度はポアソン方程式に影響しないので、そのフェルミ準位はバンド端から離れていれば任意に選べるためである。このような近似を採用することで数 V 程度の誤差は生ずるであろうが、数百 V 程度の逆電圧を計算する場合には全く問題にならない。次にこの場合の解くべき方程式を示しておく。

$$\frac{\epsilon}{q} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = N_D - N_A + n_i \exp \frac{q}{kT} (\phi_p - \psi) - n_i \exp \frac{q}{kT} (\psi - \phi_n) \dots \dots \dots (49)$$

降伏電圧を求める場合にはイオン化積分⁽²⁾を電気力線に沿って行ない、これが1となったときの電圧とすればよい。またガードリングのような浮いた電位が存在する場合でも適切な仮定を導入することで計算を行なうことができる。

3.2 GTO の順電圧降下異常現象の解析⁽¹⁵⁾

GTO (ゲートターンオフサイリスタ) は応用上多大の利点をもつため近年その開発が盛んに行なわれるようになった。ターンオフ可能なアノード電流値は大き

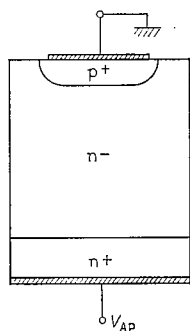


図5 フェルミ準位の選び方を示すための図

いことが望まれるが、このために p ベースの不純物濃度を高くしすぎると順電圧降下がある電流密度以上に急に増大する異常特性が現われてしまう。図6はこの異常特性の実測例であるが、電流密度が 15 A/cm^2 を超えると電圧電流特性はトランジスタのように折れ曲がっている。オン状態を維持するのにゲート電流は不用であるため、この特性は確かにサイリスタのものである。この節では数値計算モデルの一つの応用例としてこの異常特性を取りあげ、これを避けるための設計条件を明らかにする。

図7は上記の GTO の電圧電流特性の計算結果を示している。曲線1は本モデルによる計算結果であり、図6の特性を良く再現している。曲線2は曲線1のモデルから高不純物のドーピングによる禁制帯幅の減少の効果を除いたときのもの、曲線3は更にオージェ再結合を除いたときのもの、そして曲線4は更にキャリア同士の散乱の効果を除いたときのものである。この比較から高不純物の影響が最も大きいことがわかる。図8は GTO の内部のキャリア分布を示す。素子にかかる電圧が2Vになると中央接合に空乏層がみられる。計算結果を詳しく解析してみるとこの空乏層の生ずる理由は p ベースの不純物濃度が高く npn 三層の電流増幅率 α_{npn} が小さいので、中央接合での電子電流と正孔電流の比 J_n/J_p が移動度の比 μ_n/μ_p より小

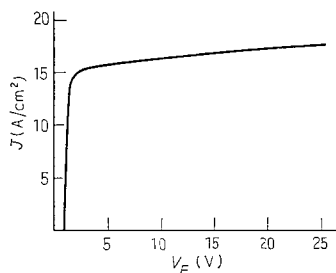


図6 GTO の異常特性(実測)⁽¹⁵⁾

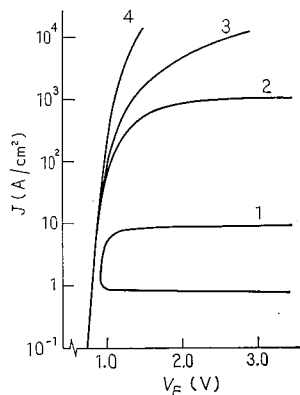


図7 モデルによる計算結果 (本文参照)⁽¹⁵⁾

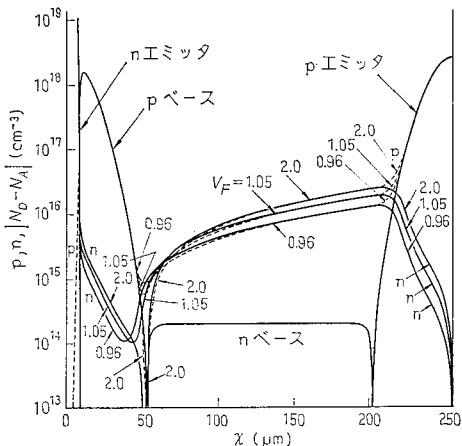


図 8 GTO 内部のキャリア分布を印加電圧 V_F を変量として示す図⁽¹⁵⁾

さくなっているために電子密度の極小値がpベース中に生じているためであることがわかる。すなわち、電流密度が増大して pnp 三層の増幅率 α_{pnp} が減少すると電界は主にキャリア密度の少ない部分、この場合は中央接合にかかる。ところが負の電荷は主に p ベースのイオン化したアクセプタによって与えられるので有効に電流を増大させることができず、逆にそのキャリア密度を減少させ、空乏層を生じてしまう⁽¹⁵⁾。この異常現象を避けるためにはキャリア密度の極小値を n ベース中に位置させればよく、中央接合で $J_n/J_p > \mu_n/\mu_p (\approx 2.7)$ が条件である。これは $\alpha_{pnp} > 0.73$ に対応する。このような条件下ではゲートターンオフ可能な電流値を大きく設計してもサージ電流耐量の大きい GTO が実現できる。

3.3 GTO のターンオフプロセスのシミュレーション⁽⁸⁾⁽¹⁶⁾

ここでは GTO のターンオフプロセスに特徴的な導通領域の縮小 (素子中央への電流集中) や素子内部の温度上昇をシミュレートすることでこの現象を考察する。

GTO の素子全体について基本方程式を解くことは格子点の数が多くなりすぎてしまうので必要最小限の図9の構造について計算を行なう。図の構造は左右対称であるから実際にはこの半分を扱えばよい。格子点の数はx方向で7、y方向で55とする。特にx方向の格子点の数を節約するために、ゲート電極の条件はオーミック電極の条件を用いなくてゲート電流値を与える方法を取り、キャリア密度の変動を許すことにする。具体的にはゲート電極のある格子点では次の条件を与える。

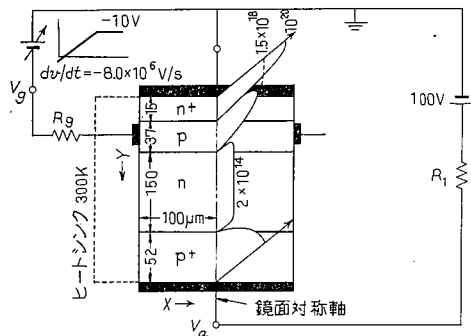


図 9 計算に用いる GTO の構成⁽⁸⁾

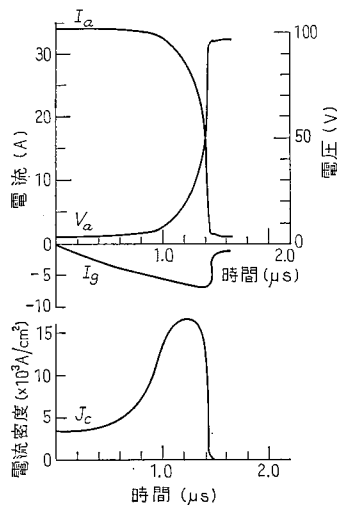


図 10 ターンオフ波形の計算結果 (下図は導通領域の電流密度 J_c の変化を示す)⁽⁸⁾

$$i_g(N) = [V_g - \phi_p(N)] / r_g(N) \dots \dots \dots (50)$$

上式で $i_g(N)$ はゲート電極のついている格子点から外に出ていくゲート電流を表わす。 $r_g(N)$ はその点の不純物濃度に反比例し、この抵抗を並列接続したものが R_g となるように決める。解くべき方程式は二次元に拡張した(34)式の右辺にゲート電流を加えたものとなる。差分方程式は SLOR 法を用いて解くことができる。

実際の計算では、まず GTO 素子に 34 A (3,400 A/cm²) の電流を流し、これに負のゲート電圧 V_g が $-8.0 \text{ V}/\mu\text{s}$ の割合で増加して印加されるものとする。これはゲート回路のインダクタンスの影響を等価的に考慮したものである。またゲート抵抗 R_g は 1Ω とし、主回路の電源電圧は 100V としてある。図 10 は計算されたターンオフ波形を示す。蓄積時間は約 1.1 μs 、下降時間は抵抗負荷のため短く 0.3 μs である。図 11 に $t=1.39 \mu\text{s}$ 時の電子密度の分布を示す。 p

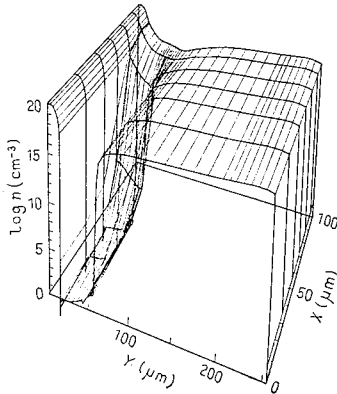


図 11 $t=1.39 \mu\text{s}$ 時の電子密度の分布⁽⁸⁾

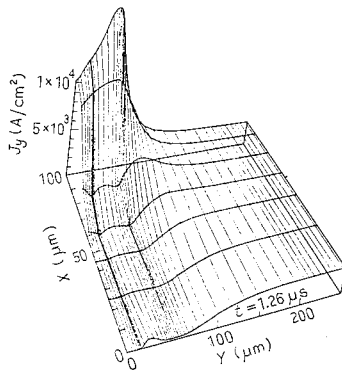


図 12 $t=1.26 \mu\text{s}$ 時の電流密度 Y 方向成分の分布⁽⁸⁾

層中ではほとんどの電子が排出され、中央の細い部分(約 $50 \mu\text{m}$)だけがオン状態にあること、そして n ベース中の過剰キャリアはこの時点ではほとんど排出されていないことがわかる。図 12 は Y 方向の電流の分布を示している。細い導通領域に $17,000 \text{ A/cm}^2$ の電流が流れているにもかかわらず、アノード側では一律な電流が流れている。導通領域の横幅が $50 \mu\text{m}$ と狭くなるのは GK 間接合でキャリア密度が 10^{18} cm^{-3} を超えるため移動度の低下が起きていることによる。電源電圧が 100 V と低いので n ベース中のキャリア排出はあまり起らない。電源電圧を 200 V とし誘導負荷で同じ計算を行なうとアノード電圧の回復につれて n ベース中にも高電界が生じ導通領域近辺の n ベースの過剰な電子と正孔が排出されるようになる。この排出されたキャリアは負のゲート電流を打ち消すように働くので、素子内の不純物やキャリア寿命の分布が一様でない電流集中の原因となる。なお素子内の温度上昇は今の場合、中央接合で高々 20°C 程度にすぎないが、これは電源電圧が 100 V と低く、また抵抗負荷であり

スイッチングロスが小さいためである。

4. ま と め

半導体素子の数値解析は素子の設計上非常に有効であるが問題点も数多くある。それは素子設計が高度化するにつれて二次元や三次元モデルが必要となるが、(44)式を速やかに解く安定した反復解法がないことや、より正確なモデルが要求されていることなどである。しかし、計算機の性能が向上すればこれらの問題は解消される方向にあるので、今後、素子破壊の解析のような高度な問題にも応用が可能になり⁽¹⁶⁾、その有用性も増していくものと期待される。

(昭和 58 年 7 月 21 日 受付)

文 献

- (1) D. L. Scharfetter & H. K. Gummel: "Large-Signal Analysis of a Silicon Read Diode Oscillator" *IEEE Trans. Electron Devices* ED-16, 1, 64 (1969)
- (2) S.M. Sze: "Physics of Semiconductor Devices" WILL-EY-INTERSCIENCE (New York)
- (3) R. Stratton: "Semiconductor Current-Flow Equations (Diffusion and Degeneracy)" *IEEE Trans. Electron Devices* ED-19, 12, 1288 (1972)
- (4) M.S. Adler: "Accurate Calculations of the Forward Drop and Power Dissipation in Thyristors" *ibid.* ED-25, 1, 16 (1978)
- (5) A. Nakagawa: "One Dimensional Device Model of the npn Bipolar Transistor Including Heavy Doping Effects under Fermi Statistics" *Solid-State Electronics* 22, 11, 943 (1979)
- (6) H.P.D. Lanyon & R.A. Tuft: "Bandgap Narrowing in Heavily Doped Silicon" 1978 *IEEE IEDM Technical Digest* p. 316.
- (7) R. Overstraeten, H. De Han & R. Mertens: "Transport Equations in Heavy Doped Silicon" *IEEE Trans. Electron Devices* ED-20, 3, 290 (1973)
- (8) A. Nakagawa & D.H. Navon: "A Time- and Temperature-Dependent Simulation of the GTO Turn-Off Process" 1982 *IEDM Technical Digest* p. 496.
- (9) 倉田: 「超 LSI 入門シリーズ① バイポーラトランジスタの動作理論」近代科学社
M. Kurata: "Numerical Analysis for Semiconductor Devices", D. C. Heath & Co., 1982 (Lexington)
- (10) 磯田・大野: Fortran による数値計算ハンドブック (オーム社)
- (11) A. Meijerink & H.A. van der Vorst: "An Iterative Solution Method for Linear Systems of Which the Coefficient Matrix is a Symmetric M-Matrix" *Mathematics of Computation* 31, 137, 148 (1977)
- (12) H.L. Stone: "Iterative Solution of Implicit Approximations of Multidimensional Partial Differential Equations" *SIAM J. Numerical Anal.* 5, 3, 530 (1968)
- (13) H.K. Gummel: "A Self-Consistent Iterative Scheme for One-Dimensional Steady State Transistor Calculations" *IEEE Trans. Electron Devices* ED-11, 10, 455(1964)
- (14) S. Yasuda & M. Kurata: "Two-Dimensional Field Distribution Analysis of Reverse Biased p-n Junction Devices" *Solid-State Electronics* 23, 10, 1077 (1980)
- (15) A. Nakagawa: "Numerical Analysis on Abnormal Thyristor Forward Voltage Increase due to Heavy Doping in Gated P-Base Layer" *ibid.* 24, 5, 455(1981)
- (16) 中川・大橋: 「GTO のターンオフ破壊モデル」電子通信学会技術研究報告 83, 5, 23 (昭 58-4)
H. Ohashi & A. Nakagawa: "A Study on GTO Turn-Off Failure Mechanism" 1981 *IEDM Technical Digest* p. 414