

幾何モデルに基づく双対デバイス・シミュレーションの比較

Kojima, Toshiaki / Dang, Ryo / 檀, 良 / 小島, 敏明

(出版者 / Publisher)

法政大学工学部

(雑誌名 / Journal or Publication Title)

法政大学工学部研究集報 / 法政大学工学部研究集報

(巻 / Volume)

26

(開始ページ / Start Page)

53

(終了ページ / End Page)

63

(発行年 / Year)

1990-02

(URL)

<https://doi.org/10.15002/00003926>

幾何モデルに基づく双対デバイス・ シミュレーションの比較

小 島 敏 明*・檀

良**

A Comparison of Dual Device Simulation Methods Based on Geometrical Modeling

Toshiaki KOJIMA* and Ryo DANG**

Abstract

In this paper, we propose to apply a finite difference method (FDM) to Voronoi and Delaunay mesh systems utilizing their geometrical orthogonality. And we found that in contrast to the discretization based on the Delaunay mesh system can be identified as the method that has been conventionally employed so far, the discretization based on the Voronoi mesh system is completely novel, not only in terms of the mathematical formulation but also in the application of boundary conditions.

Application of this new system to MOSFET DC analysis is very effective and the obtained solutions are in excellent agreement with conventional FDM's results.

§ 1. は じ め に

現在において、デバイス・シミュレータは VLSI を設計する上で必要不可欠なツールとなっている。デバイス・シミュレータでは、数値計算を行うため差分法や有限要素法等の数学的な近似を行うが、如何に空間を離散化するか非常に重要である。筆者らは空間の離散化法として、幾何学モデルに基づく Voronoi, Delaunay 系離散化法を半導体デバイス・シミュレーションへの導入を試みている¹⁻²⁾。Voronoi, Delaunay 離散化法は、二次元解析領域が Delaunay 三角形で離散化した場合、各 Delaunay の三角形の外心を結ぶ線分は Voronoi 多角形を構成する時に Delaunay 三角形の辺と Voronoi 多角形の辺は常に直交する関係にある性質を利用し、互いに独立な系として計算を実行する方法である。このとき各系が直交条件を満たすことから境界条件の取扱いが異なる。通常 Delaunay 系離散化法では、格子点間でパラメータの一次関数近似で表せ、Voronoi 系離散化法は格子点間の midpoint に補助節点を置き、補助節点と格子点の間で一次関数近似となる。両離散化法を差分法と比較を行うため直交型メッシュになる特別な場合について考えると、

* 法政大学院電気工学専攻

** 法政大学工学部教授

Delaunay 系離散化法が従来型の差分法となる。一方, Voronoi 系離散化法が内部節点を用いる特殊な差分法となる。格子点間で内部節点を用いる差分法を半導体デバイス・シミュレーションへ導入することは試みられていないが, この方法が安定しかつ従来法と比較して, 同等の解の精度を期待できる。

本稿では, MOSFET の DC 解析を対象とし, ゲート, ドレインにバイアスを印加したときの内部状態, 例えばポテンシャル分布, 電子, 正孔のキャリア濃度分布について比較を行い, さらに端子に流れる電流値についての比較等も行い Voronoi 系離散化法が半導体デバイスシミュレーションに有効な方法となることを示す。

§ 2. 基本方程式及びその解法

半導体素子内部の諸現象を表す基本方程式は, 以下に示す Poisson 方程式と正孔, 電子の電流連続式である。

(Poisson 方程式)

$$\nabla^2 \phi = -\frac{q}{\varepsilon} (p - n + N_D - N_A) \quad (1)$$

(電流連続式)

1) 正 孔

$$\nabla J_p = -(\nabla q \mu_p p \nabla \phi - q D_p \nabla p) = -q \cdot GR_p \quad (2)$$

2) 電 子

$$\nabla J_n = -(\nabla q \mu_n n \nabla \phi - q D_n \nabla n) = -q \cdot GR_n \quad (3)$$

ここで ε は誘電率, N_D, N_A は, ドナー, アクセプタ濃度, μ_n, μ_p は電子正孔の移動度, D_n, D_p は, 電子, 正孔の拡散定数, $GR_{n,p}$ は電子, 正孔の生成再結合率を表す。 q, k, T はそれぞれ素電荷量, Boltzmann 定数, 温度である。この基本方程式を解くことにより得られる未知数は, ポテンシャル ϕ , 電子濃度 n , 正孔濃度 p である。また解法としては, Fig. 1 に示すように, 非結合法を用い Gummel アルゴリズムを用いて収束させる⁹⁾。この手法は, Poisson 方程式, 電子, 正孔の電流連続式を個々に独立に解き, それぞれの解を順次収束させ, 最終的に真の解を求める。次に基本方程式の線形化について述べる。電子濃度 n , 正孔濃度 p は Boltzmann 近似を用いて表すと, それぞれ,

$$\text{電子} \quad n = n_i \cdot \exp\{q(\phi - \phi_n) \cdot kT\} \quad (4)$$

$$\text{正孔} \quad p = n_i \cdot \exp\{q(\phi_p - \phi) \cdot kT\} \quad (5)$$

と表せる。ここで, ϕ_n, ϕ_p は電子, 正孔の擬フェルミ順位である。さらに上記の式と Einstein の関係式

$$D = \mu kT / q \quad (6)$$

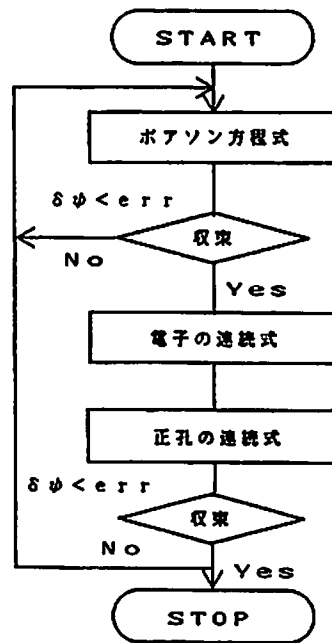


Fig. 1 半導体方程式の数値解析フロー・チャート

を用いて、規格化して書くと(1), (2), (3)式は,

$$\nabla \cdot (\epsilon \nabla \phi) = q(n_i \cdot \exp(\phi - \phi_n) - n_i \cdot \exp(\phi_p - \phi) + N_D - N_A) \quad (7)$$

$$\nabla(n_i \cdot \mu_n \cdot \exp(\phi) \nabla \exp(-\phi_n)) = GR_n \quad (8)$$

$$\nabla(n_i \cdot \mu_p \cdot \exp(-\phi) \nabla \exp(\phi_p)) = GR_p \quad (9)$$

(7), (8), (9) 式は, ϕ , $\exp(-\phi_n)$, $\exp(\phi_p)$ の三つを未知数とする連立方程式となる。(8), (9) 式の電流連続式に関しては, 未知数を $\exp(-\phi_n)$, $\exp(\phi_p)$, に取ると線形になる。しかし (7) 式の Poisson 方程式は次に示す Newton 法を用いて線形化を行う必要がある。

これは ϕ を初期値 ϕ_0 から始め, 次回の ϕ を次式で見積り,

$$\phi_{k+1} = \phi_k + \delta\phi_k \quad (10)$$

$\delta\phi_k$ に関して線形化を行う。(10) 式を (7) 式に代入し,

$$\exp(\phi_k + \delta\phi_k - \phi_n) = (1 + \delta\phi_k) \exp(\phi_k - \phi_n) \quad (11)$$

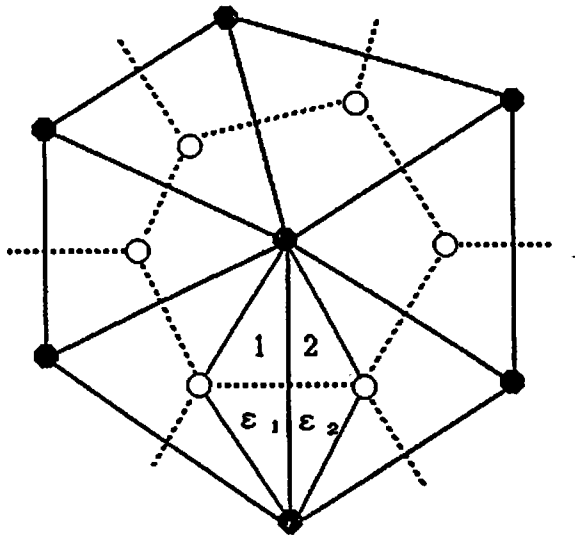
に注意すると, (7) 式は,

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\epsilon \nabla \delta\phi_k) - q \cdot n_i \{ \exp(\phi_k - \phi_n) + \exp(\phi_p - \phi_k) \} \cdot \delta\phi_k \\ = q \cdot n_i \{ \exp(\phi_k - \phi_n) + \exp(\phi_p - \phi_k) \} - \nabla \cdot (\epsilon \nabla \phi_k) + q(N_A - N_D) \end{aligned} \quad (12)$$

となり $\delta\phi_k$ に関して線形化される。Poisson 方程式は, $\delta\phi < \text{error}$ となるまで収束させ, この値を真値とする。

§ 3. 幾何学的双対性

Fig. 2 は二次元解析領域の離散化を行った節点図の 1 部分を示す。各隣接点を結んで得られる



● Delaunay 節点

○ Voronoi 節点

Fig. 2 Voronoi-Delaunay 線図

三角形による空間の離散化法を Delaunay 三角法と言う⁴⁾。この三角形を Delaunay の三角形と称し、各三角形の外心を結んで得られる多角形を Voronoi 多角形と呼ぶ。Voronoi 多角形は、各節点の中点を垂直に分割するいわゆる垂直二等分線が構成する図形を示す。従って任意の解析領域は Delaunay 三角形または、Voronoi 多角形のどちらかで埋め尽くすことができることを意味する。本稿では各々の図形により構成する系を、Delaunay 系、及び Voronoi 系と呼んでいる。今、Fig. 2 の斜線部分に Delaunay 三角形と Voronoi 多角形の辺により構成される局所座標系を考える。媒質の境界を Delaunay 三角形の辺を境に媒質が異なり、領域 1、領域 2 において、 ϵ_1 、 ϵ_2 を持つとする。このとき上記の Poisson 方程式は、必然的に次の境界条件を満足する。電流連続式に関しては、MOSFET 解析の場合媒質の境界問題を特別考慮する必要がないのでここでは割愛する。なぜなら MOSFET 構造の媒質は、酸化膜と基板のシリコンである。このとき電流は基板のシリコン中でのみ流れるので、基本的にはシリコン基板の単一媒質でのみ電流連続式を解く理由による。Voronoi 多角形の辺を x 軸とし、Delaunay 三角形の辺を y 軸とすると、Fig. 2 に示すように誘電率 ϵ が、異なる ϵ_1 、 ϵ_2 を持つ領域 1、2 の間で、 y 軸方向では次の電界の共通条件を満足する。

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial y} \right|_{\text{領域 1}} = \left. \frac{\partial \phi}{\partial y} \right|_{\text{領域 2}} \quad (13)$$

また x 軸方向では、領域 1、2 の間で電束密度共通条件を満足する。

$$\epsilon_1 \left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_{\text{領域 1}} = \epsilon_2 \left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_{\text{領域 1}} \quad (14)$$

の境界条件を満足する必要がある。このように例えば Poisson 方程式を局所座標系で x 軸と y 軸

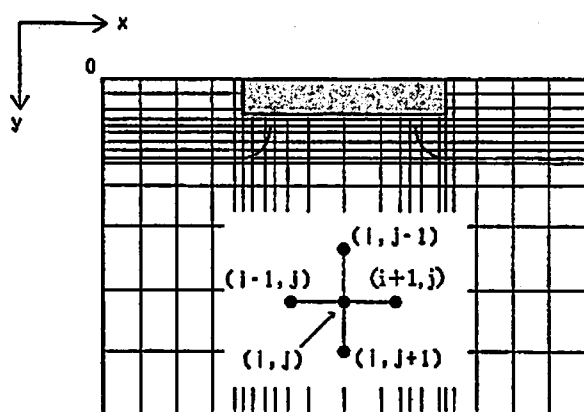


Fig. 3 差分法に使われる直交座標系のメッシュ発生例

方向に分離する方法を，局所一次元化法という⁵⁾。Voronoi, Delaunay 離散化法は局所一次元化法を局所直交座標上で実行し，Voronoi 系，Delaunay 系を独立に定式化することに基づく。

§ 4. 差分法を用いた Poisson 方程式の定式化

一般に，偏微分方程式の数値解法としてここで取る方法について述べる。一般に偏微分方程式を数値的に解く手法に差分法と有限要素法等があるが，ここでは差分法を採用した。問題の解析領域は，2次元問題について考えるので点差分近似を用いている。5点差分近似は，Fig. 3に示すような直交座標系を用い，点 (i, j) における未知数の値を中心にそれぞれを囲む格子点の関係を定式化することである。そこで Voronoi, Delaunay 離散化法を直交メッシュへ応用を図ると，例えば媒質の境界の扱いは MOSFET を例にとると Fig. 4で表せる。よって差分化の方法が異なる。以下では各々の系に差分法を用いた定式化について述べる。また (12) 式は一般に Gauss 定理を用いて積分をし，1階偏数微分方程式の形にすることができる。 x - y 座標系の格子点を囲む微少面積を δs とすると，(12) 式はさらに

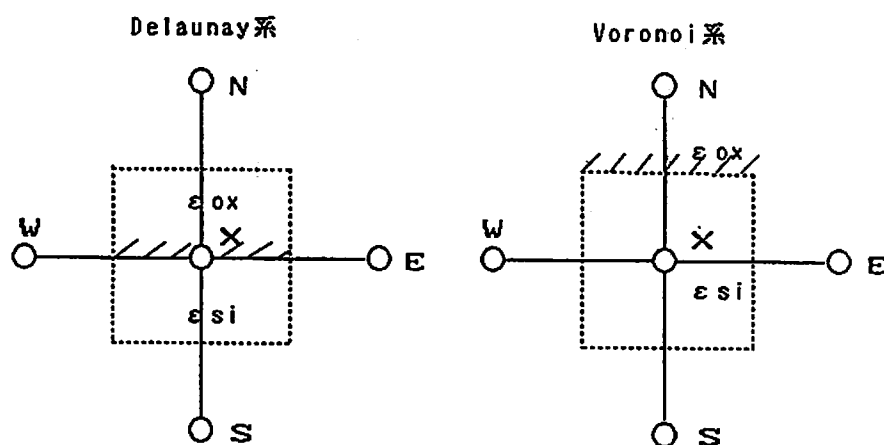


Fig. 4 Voronoi-Delaunay 系離散化による MOSFET の媒質境界の違い

$$\begin{aligned}
& \int_s \nabla \cdot (\epsilon \nabla \delta \phi_k) \cdot ds - q \cdot n_i \{ \exp(\phi_k - \phi_n) + \exp(\phi_p - \phi_k) \} \cdot \delta \phi_k \cdot \delta s \\
& = q \cdot n_i \{ \exp(\phi_k - \phi_n) + \exp(\phi_p - \phi_k) \} \cdot \delta s - \int_s \nabla \cdot (\epsilon \nabla \phi_k) \cdot ds + q(N_A - N_D) \cdot \delta s
\end{aligned} \quad (15)$$

と展開される。

4.1 Delaunay 系への差分法の適用

Fig. 5 は, Delaunay 系の差分格子点と媒質の境界に一般性を持たせた図である。媒質の境界は格子点上にあるので, 媒質の誘電率を各ブロックごとに $\epsilon_1 \sim \epsilon_4$ とすると (15) 式は, 最終的に次のように線形化される。

$$\begin{aligned}
& \left(\frac{dx_{i+1}}{2} \epsilon_1 + \frac{dx_i}{2} \epsilon_4 \right) \frac{\delta \phi_N - \delta \phi_x}{dy_j} - \left(\epsilon_1 \frac{dy_j}{2} + \epsilon_2 \frac{dy_{j+1}}{2} \right) \frac{\delta \phi_E - \delta \phi_x}{dx_{i+1}} + \\
& \left(\epsilon_2 \frac{dx_{i+1}}{2} + \epsilon_3 \frac{dx_i}{2} \right) \frac{\delta \phi_S - \delta \phi_x}{dy_{j+1}} - \left(\epsilon_3 \frac{dy_{j+1}}{2} + \epsilon_4 \frac{dy_j}{2} \right) \frac{\delta \phi_W - \delta \phi_x}{dx_i} - \\
& q \cdot n_i \{ \exp(\phi_k - \phi_n) + \exp(\phi_p - \phi_k) \} \cdot \delta \phi_k \cdot \delta x_i \cdot \delta y_j \\
& = q [n_i \{ \exp(\phi_k - \phi_n) + \exp(\phi_p - \phi_k) \} + (N_A - N_D)] \cdot \delta x_i \cdot \delta y_j - \\
& \left\{ \left(\epsilon_4 \frac{dx_i}{2} + \epsilon_1 \frac{dx_{i+1}}{2} \right) \frac{\phi_N - \phi_x}{dy_j} - \left(\epsilon_1 \frac{dy_j}{2} + \epsilon_2 \frac{dy_{j+1}}{2} \right) \frac{\phi_E - \phi_x}{dx_{i+1}} + \right. \\
& \left. \left(\epsilon_2 \frac{dx_{i+1}}{2} + \epsilon_3 \frac{dx_i}{2} \right) \frac{\phi_S - \phi_x}{dy_{j+1}} - \left(\epsilon_3 \frac{dy_{j+1}}{2} + \epsilon_4 \frac{dy_j}{2} \right) \frac{\phi_W - \phi_x}{dx_i} \right\} \quad (16)
\end{aligned}$$

この式は, 中心点 (x) と隣接格子点間 (N, E, W, S) においてテーラー級数展開の第2階までを使用した。(16) 式は, デバイス・シミュレーションで用いられる一般的な差分法の形である⁶⁾。

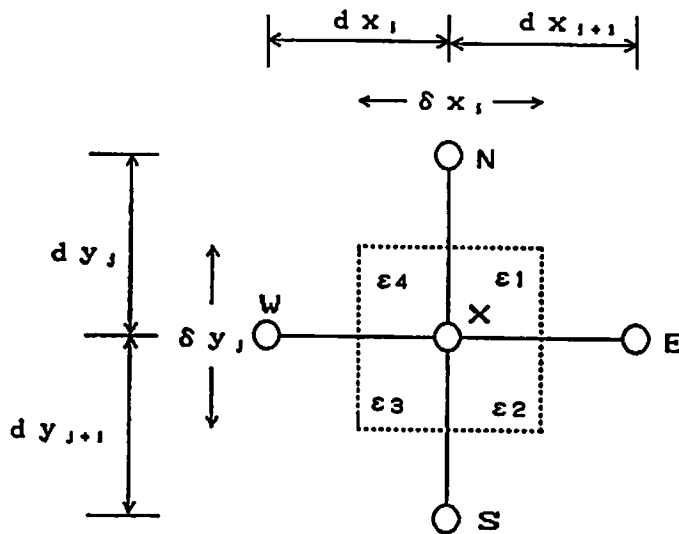


Fig. 5 Delaunay 系離散化に用いる5点差分の座標系

4.2 Voronoi 系への差分法の適用

Fig. 6 は, Voronoi 系の差分格子点と媒質の境界の位置関係を示した図である。Delaunay 三角

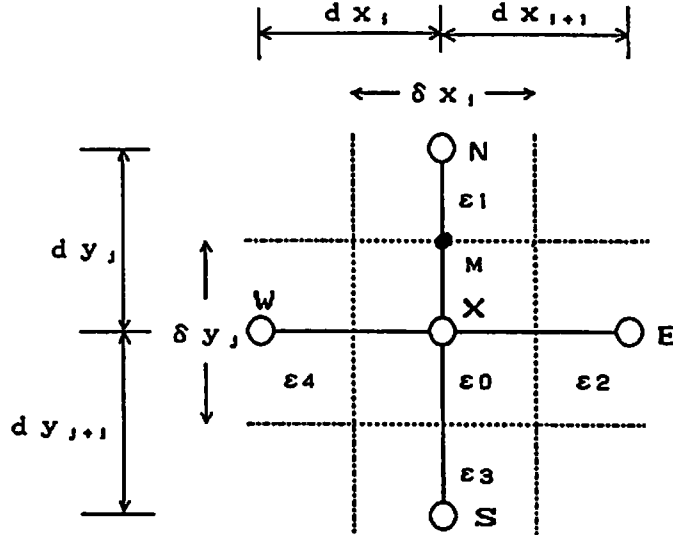


Fig. 6 Voronoi 系離散化に用いる 5 点差分の座標系

形と Voronoi 多角形は幾何学的に直交する関係上、媒質の境界は、Voronoi 系格子点間の垂直 2 当分線上に位置する。よって媒質を各ブロックごとに分割すると $\varepsilon_0 \sim \varepsilon_4$ となる。境界条件として (14) 式を満たすように離散化すると Voronoi 系で差分化を行った最終形は次の形となる。

$$\begin{aligned}
 & 2\delta x_i \left\{ \frac{1}{\delta y_i} \left[\frac{\delta \phi_N - \delta \phi_x}{1/\varepsilon_1 + 1/\varepsilon_0} \right] + \frac{1}{\delta y_{j+1}} \left[\frac{\delta \phi_s - \delta \phi_x}{1/\varepsilon_2 + 1/\varepsilon_0} \right] \right\} + \\
 & 2\delta y_j \left\{ \frac{1}{\delta x_i} \left[\frac{\delta \phi_w + \delta \phi_x}{1/\varepsilon_3 + 1/\varepsilon_0} \right] + \frac{1}{\delta x_{i+1}} \left[\frac{\delta \phi_E - \delta \phi_x}{1/\varepsilon_4 + 1/\varepsilon_0} \right] \right\} - \\
 & q \cdot n_i \{ \exp(\phi_k - \phi_n) + \exp(\phi_p - \phi_k) \} \cdot \delta \phi_k \cdot \delta x_i \cdot \delta y_j \\
 & = q \cdot [n_i \{ \exp(\phi_k - \phi_n) + \exp(\phi_p - \phi_k) \} + (N_A - N_D)] \cdot \delta x_i \cdot \delta y_j - \\
 & 2\delta x_i \left\{ \frac{1}{\delta y_i} \left[\frac{\phi_N - \phi_x}{1/\varepsilon_1 + 1/\varepsilon_0} \right] + \frac{1}{\delta y_{j+1}} \left[\frac{\phi_s - \phi_x}{1/\varepsilon_2 + 1/\varepsilon_0} \right] \right\} + \\
 & 2\delta y_j \left\{ \frac{1}{\delta x_i} \left[\frac{\phi_w + \phi_x}{1/\varepsilon_3 + 1/\varepsilon_0} \right] + \frac{1}{\delta x_{i+1}} \left[\frac{\phi_E - \phi_x}{1/\varepsilon_4 + 1/\varepsilon_0} \right] \right\} \quad (17)
 \end{aligned}$$

(17) 式は、格子点間の中点を補助節点とおき、中心点 (x) を中心にその補助節点を用いてテーラー級数展開第 2 項をとり展開する。上式より Voronoi 系を用いた離散化が、デバイス・シミュレーションへの適用が可能である事を示した。補助節点の求めかたは付録 1 に示す。

§ 5. 電流連続式の離散化

電流連続式の離散化には Scharfetter-Gummel の離散化法が用いている⁷⁾。一般に流体力学では、指数法と呼ばれる方法を用いており中心差分と比較して離散化誤差を小さくできると報告されている。計算時間は、複雑な式の形により中心差分より増大するが、現在の計算機ではほとんど問題は無くなった。当手法は、Voronoi, Delaunay 系に適用するが、前述したように基本的に単一媒質中で考えれば良いので、媒質の境界問題を特別考慮する必要がない。よって Voronoi,

Delaunay 系で、定式化する基本的な形は同じである。電子、正孔の線形化した電流連続式(8), (9)式を、5点を用いて定式化すると次式となる。

(電子の電流連続式)

$$\begin{aligned}
 & \frac{\mu_s(\phi_s - \phi_x)\delta x_i}{(\exp(-\phi_x) - \exp(-\phi_s))\delta y_{j+1}} (\exp(-\phi_n^{(s)}) - \exp(-\phi_n^{(x)})) + \\
 & \frac{\mu_N(\phi_N - \phi_x)\delta x_i}{(\exp(-\phi_x) - \exp(-\phi_N))\delta y_j} (\exp(-\phi_n^{(N)}) - \exp(-\phi_n^{(x)})) + \\
 & \frac{\mu_E(\phi_E - \phi_x)\delta y_j}{(\exp(-\phi_x) - \exp(-\phi_E))\delta y_{i+1}} (\exp(-\phi_n^{(E)}) - \exp(-\phi_n^{(x)})) + \\
 & \frac{\mu_W(\phi_W - \phi_x)\delta y_j}{(\exp(-\phi_x) - \exp(-\phi_W))\delta x_i} (\exp(-\phi_n^{(W)}) - \exp(-\phi_n^{(x)})) \\
 & = \delta y_i \cdot \delta y_j \cdot (GR_n),
 \end{aligned} \tag{18}$$

(正孔の電流連続式)

$$\begin{aligned}
 & \frac{\mu_s(\phi_s - \phi_x)\delta x_i}{(\exp(\phi_s) - \exp(\phi_x))\delta y_{j+1}} (\exp(\phi_p^{(s)}) - \exp(\phi_p^{(x)})) + \\
 & \frac{\mu_E(\phi_E - \phi_x)\delta y_k}{(\exp(\phi_N) - \exp(\phi_x))\delta y_j} (\exp(\phi_p^{(N)}) - \exp(\phi_p^{(x)})) + \\
 & \frac{\mu_E(\phi_E - \phi_x)\delta y_j}{(\exp(\phi_E) - \exp(\phi_x))\delta x_{i+1}} (\exp(\phi_p^{(E)}) - \exp(\phi_p^{(x)})) + \\
 & \frac{\mu_W(\phi_W - \phi_x)\delta y_j}{(\exp(\phi_W) - \exp(\phi_x))\delta x_i} (\exp(\phi_p^{(W)}) - \exp(\phi_p^{(x)})) \\
 & = \delta x_i \cdot \delta y \cdot (GR_p),
 \end{aligned} \tag{19}$$

Voronoi, Delaunay 系を用いて離散化された Poisson 方程式は、(18)式、(19)式と併用して、未知数を求める。

§ 6. 解 析 結 果

Voronoi 系及び Delaunay 系で5点差分を用いて、Fig. 7に示すような MOSFET の解析を行

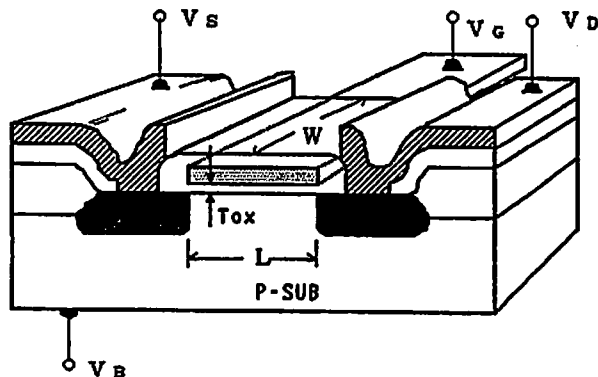


Fig. 7 MOSFET 断面図

った。Delaunay 系を用いた差分法は、基本的には従来デバイスシミュレーションに用いる差分法と同じであり、ここでは、Voronoi 系によるシミュレーションを強調し、従来法との比較を行う。解析したデバイスは、チャンネル長 L を $1.2(\mu\text{m})$ 、酸化膜厚 T_{ox} を $200(\text{\AA})$ 、基板濃度 N_A を $10^{16}(\text{cm}^{-3})$ 、ソース、ドレイン拡散濃度のピークを $10^{20}(\text{cm}^{-3})$ で与え、誤差関数で落としている。最初に両離散化法を用いて、ゲート電圧 $5[\text{V}]$ 、ドレイン電圧 $5[\text{V}]$ を印加したときのポテンシャル分布、電子濃度分布、正孔濃度分布を三次元グラフィックを用いて比較を行っている。Fig. 8 (a)は、Voronoi 系を用いてシミュレーションしたポテンシャル分布である。ゲートおよびドレインで $5[\text{V}]$ + 内蔵電位分持ち上がっている。またチャンネル部分ではソースからドレインまで直線的に変化している。これよりチャンネル中の電子がこの傾きで移動するのが分かる。Fig. 8 (b)は従来法の差分法を用いて解析したポテンシャル分布図である。比較して分かるように、Poisson 方程式を解いて得られるポテンシャル分布は、それぞれ良く対応している。Fig. 9 (a), (b)は、電子濃度分布を比較している。酸化膜の界面付近の反転層形成部分がはっきりと

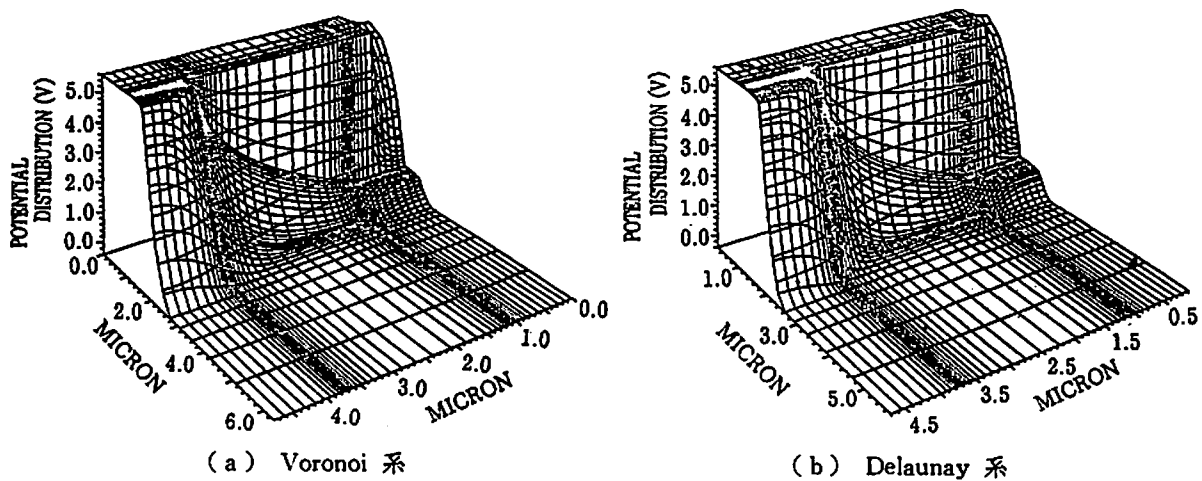


Fig. 8 ポテンシャル分布図

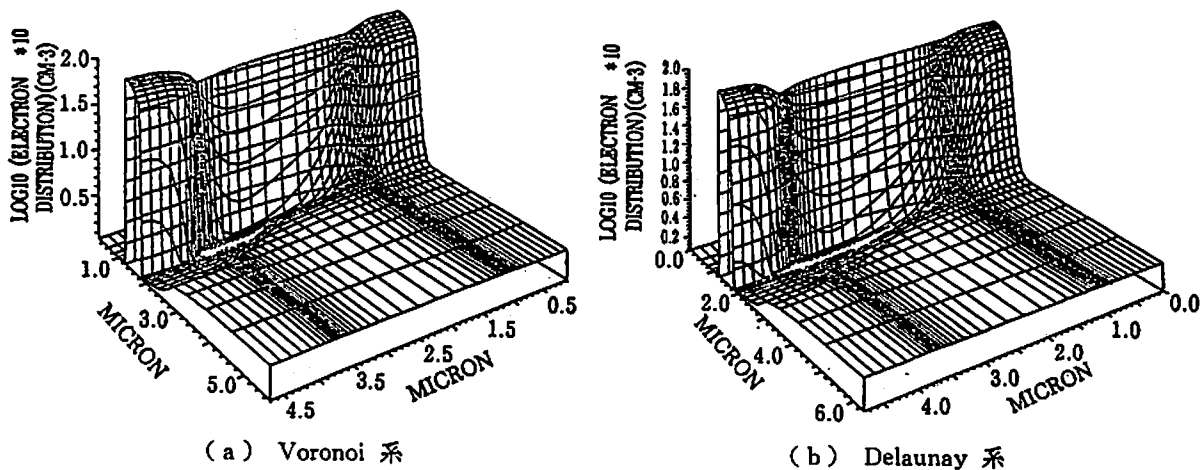


Fig. 9 電子濃度分布図

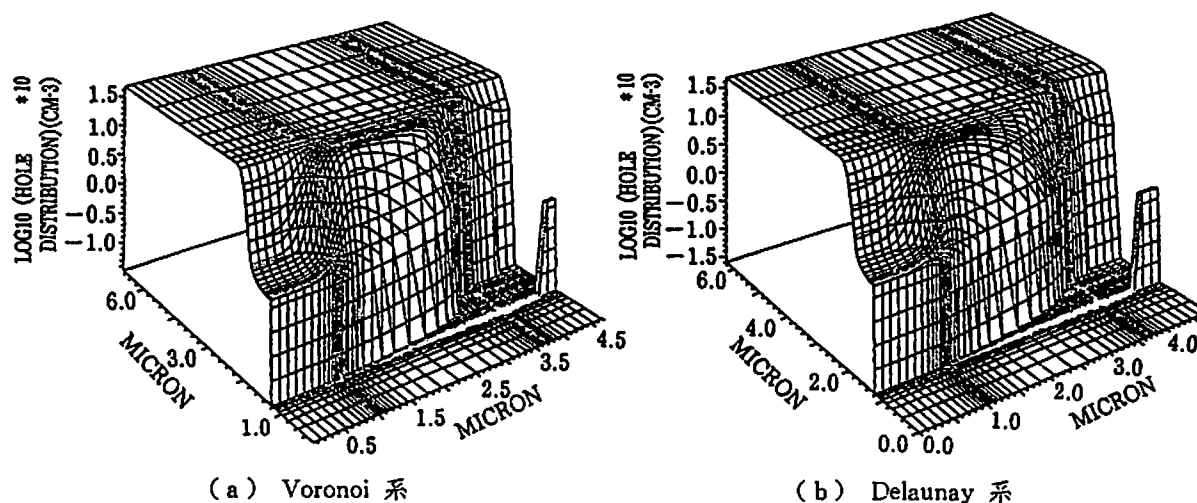
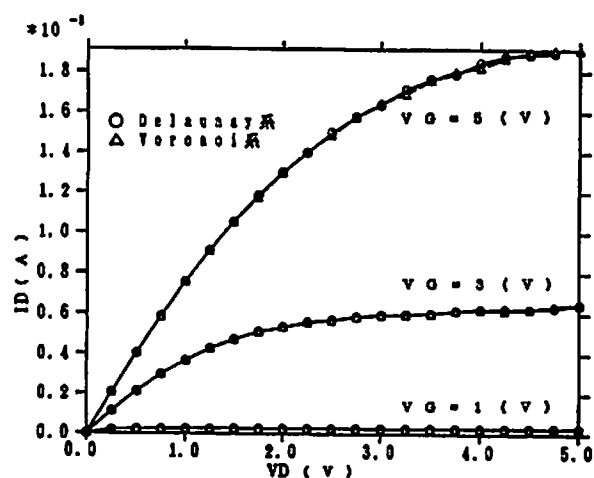
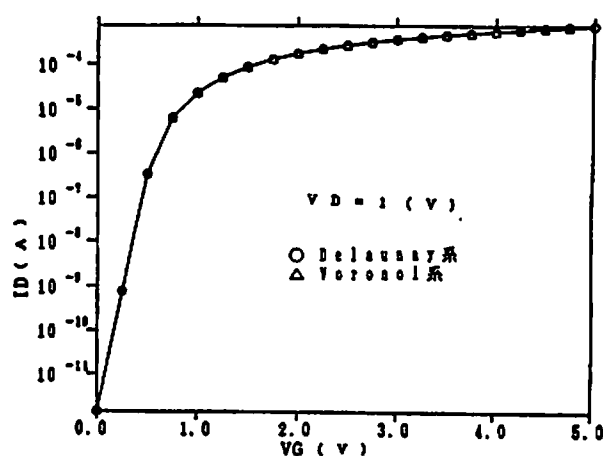


Fig. 10 正孔濃度分布図

分かる。Fig. 10(a), (b)は正孔濃度分布を示す。正孔がほとんど基板の奥に存在し、空乏化している界面部には、ほとんど存在しない。両系を用いて計算される解は、同等の解の精度を保証できることが分かる。

Fig. 11は、MOSFETの I_D - V_D 特性である。またFig. 12は、 I_D - V_G 特性を示す。この二つの図を比較しても分かるように、端子電流特性も十分な一致が得られている。

Fig. 11 I_D - V_D 特性Fig. 12 I_D - V_G 特性

§7. 結 言

我々は、幾何学的双対性を利用した Voronoi, Delaunay 系離散化法を、直交型メッシュを用いた差分法への応用を考えた。その結果 Delaunay 系に差分法を適用した場合は従来型の差分法と基本的には同じであることが分かった。Voronoi 系に差分法を適用した場合、テーラー級数展開を行う隣接格子点を補助節点にとる特殊なものであることが分かった。また今回検討した Voronoi 系を用いる手法が従来の差分法に比べ、同等の精度の解が得られることが分かった。

謝 辞

論文作成にあたり、多大なるご協力をいただいた研究室の皆様方に感謝いたします。

参 考 文 献

- 1) T. Kojima, Y. Saito and R. Dang: Dual Mesh Approach for Semiconductor Device Simulator. *IEEE Trans., Magn.*, MAG-25, pp.2965-2955 (1989).
- 2) 小島, 斎藤, 檀: Voronoi 多角形を系とするデバイス・シミュレータの検討. 電子学会研究予稿誌, SDM89-103 (1989).
- 3) H.K. Gummel: Self-Consistent Iterative Scheme for One- Dimensional Steady State Transistor Calculations. *IEEE Trans., Electron Devices*, ED-11, pp.455-465 (1964).
- 4) Z.J. Cendes, D. Shenton and H. Schnasser: Magnetic Field Computation Using Delaunay Triangulation and Complementary Finite Element Methods. *IEEE Trans., Magn.*, MAG-19, pp.2551-2554 (1983).
- 5) A.P. Michell: The Finite Difference Method in Partial Differential Equations. Wiley New York (1980).
- 6) T. Wada and R. Dang: Development and Application of a High-Speed 2-Dimensional Time Dependent Device Simulator (MOS2C). NASECODE-4, pp.455-465 (1964).
- 7) D.L. Scharfetter and H.K. Gummel: Large-Signal Analysis of a Silicon Read Diode Oscillator. *IEEE Trans. Electron Devices*, ED-16, pp.16-74 (1969).

付 録

Voronoi 系で差分を行う場合, 格子点間で媒質境界が存在するため境界上での補助格子点が必要となる。Voronoi 系の境界条件は, 電束密度が保存であるが, 今, Fig. 6 において格子点間 $X-N$ 間で考えると, 境界上で次の等式が成り立つ。

$$\epsilon_0 \frac{\partial \phi}{\partial y} \Big|_{\text{領域 } 0} = \epsilon_1 \frac{\partial \phi}{\partial y} \Big|_{\text{領域 } 1} \quad (\text{A } 1)$$

ここで, $\partial \phi / \partial y$ をテーラー級数第 2 項をとる。このとき境界上の補助格子点上のポテンシャル ϕ を $\phi_M^{(N)}$ とすると, 左辺は,

$$\epsilon_0 \frac{\partial \phi}{\partial y} \Big|_{\text{領域 } 0} = 2 \epsilon_0 \frac{\phi_M^{(N)} - \phi_X}{dy_j} \quad (\text{A } 2)$$

となる。また右辺は, 同様に次式となる。

$$\epsilon_1 \frac{\partial \phi}{\partial y} \Big|_{\text{領域 } 1} = 2 \epsilon_1 \frac{\phi_N - \phi_M^{(N)}}{dy_j} \quad (\text{A } 3)$$

よって A1, A2, A3 式より, $\phi_M^{(N)}$ は, 次に示すものとなる。

$$\phi_M^{(N)} = \frac{\epsilon_0 \phi_X + \epsilon_1 \phi_N}{\epsilon_0 + \epsilon_1} \quad (\text{A } 4)$$

同様にして, 補間したポテンシャルを, N, E, S, W 方向で計算を行い, このポテンシャルを用いてテーラー展開を行う。