

太陽電池シミュレータに関する技術的疑問点

Advanced Algorithm & Systems

吾妻広夫

2013年3月31日

本書類は、太陽電池シミュレータに関する技術的疑問点を、まとめたものです。

「半導体デバイス・シミュレータ・プログラム使用マニュアルおよび計算事例」という書類の後半において説明したように、ソースコード `beq_simulator-26.f90` は、以下に示す二つの問題点が有ると考えられます。

(問題点 1)

シミュレーションを長時間ステップ続けても、ダイオードを流れる電流の絶対値は、時間の経過と共に小さくなる一方で、一向に、平衡状態に達する傾向が見られない。

(問題点 2)

キャリア電子・正孔の初期速度によって、ダイオードを流れる電流値が変化してしまう。また、キャリア電子・正孔の初期速度をどのような値に設定するのが物理的に正しいのか、判断できない。

これら二つの問題点は、以下のバランス方程式(古典的輸送方程式の一種)の緩和項を、どのような形の式にするかに関係があると考えられます。

$$\begin{aligned} \frac{\partial n}{\partial t} &= -v \frac{\partial}{\partial x} (nv) - \left(\frac{\partial n}{\partial t} \right)_c, \\ \frac{\partial v}{\partial t} &= -v \frac{\partial v}{\partial x} - \frac{2}{3nm^*} \frac{\partial}{\partial x} (nw - \frac{1}{2} m^* nv^2) - \frac{eF}{m^*} - \left(\frac{\partial v}{\partial t} \right)_c, \\ \frac{\partial w}{\partial t} &= -v \frac{\partial w}{\partial x} - \frac{2}{3n} \frac{\partial}{\partial x} \left[\left(nv - \frac{\kappa}{k_B} \frac{\partial}{\partial x} \right) \left(w - \frac{1}{2} m^* v^2 \right) \right] - eFv - \left(\frac{\partial w}{\partial t} \right)_c, \\ 0 &= \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{e}{\epsilon_s} (N_D - n - N_A + \tilde{n}). \end{aligned}$$

上式のうち、1番目はキャリア電子密度に関するバランス方程式、2番目はキャリア電子速度に関するバランス方程式、3番目はキャリア電子運動エネルギーに関するバランス方程式と呼ばれています。4番目の式は、ポアソン方程式です。なお、議論を簡略化するため、ここでは、キャリア電子のバランス方程式のみを考え、キャリア正孔のバランス方程式は省略することとします。

上の連立一階微分方程式を解く際、最も重要なのは、衝突項である $\left(\frac{\partial n}{\partial t} \right)_c$, $\left(\frac{\partial v}{\partial t} \right)_c$, $\left(\frac{\partial w}{\partial t} \right)_c$ を、どのように形の式に定めるかだと考えられます。

通常、半導体デバイスの教科書では、これらの衝突項を、以下の形で与えると良いと書かれています。

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial n}{\partial t} \right)_c &= G - R, \\ \left(\frac{\partial v}{\partial t} \right)_c &= -v_p(w)v, \\ \left(\frac{\partial w}{\partial t} \right)_c &= -v_w(w)(w - w_0). \end{aligned}$$

上の式では、 G をキャリア生成率、 R をキャリア再結合率としています。しかし、この G および R を、具体的にどのような形の式にすべきか、はっきり定まっていないのが実情のようです。例えば、思い付くだけで、以下の数種類の形の衝突項が挙げられます。

まず、以下のようなキャリア電子密度の衝突項を考えてみます。

$$\left(\frac{\partial n}{\partial t}\right)_c = -v_n(n - n_0)$$

この場合、 n_0 をどのような値にするかという問題があります。例えば、 n_0 を熱平衡状態におけるキャリア正孔の平均密度とする考え方があるかとは思われます。

また、以下のようなキャリア電子密度の衝突項を考えることも可能です。

$$\left(\frac{\partial n}{\partial t}\right)_c = -v_n \frac{(n\tilde{n} - n_i^2)}{\sqrt{n_i^2}}$$

ただし、 \tilde{n} はキャリア正孔の密度、 n_i^2 は熱平衡状態にある電子と正孔の 2 種類の密度を掛け合わせた量とします。

キャリア電子速度の衝突項に関しても、その形は簡単には決められないようです。半導体デバイスの教科書の中には、以下の衝突項が書かれているものがあります。

$$\left(\frac{\partial v}{\partial t}\right)_c = -v_v v$$

しかし、このような衝突項を仮定すると、キャリア電子の速度は、必ず時間と共に減少して、最終的に $v=0$ で、平衡状態として落ち着くことになると予想されます。このような衝突項を仮定して、半導体デバイスの動作をシミュレーションしようとする、最終的な平衡状態において、すべてのキャリア電子が速度ゼロとなり、電流が流れないという困った事態に陥る可能性が有ります。

そこで、キャリア電子速度の衝突項を、以下のように定義する方法も考えられます。

$$\left(\frac{\partial v}{\partial t}\right)_c = -v_v(v - v_0)$$

しかし、この場合、 v_0 をどのようにして与えるかという問題が残ります。半導体中のキャリアは、熱平衡状態では、等方性の仮定から、その熱的平均速度はゼロです。従って、 v_0 の決め方は明らかではないと思われます。

ほとんどの半導体デバイスの教科書において、キャリア電子運動エネルギーの衝突項は、以下のように定義されています。

$$\left(\frac{\partial w}{\partial t}\right)_c = -v_w(w - w_0)$$

ただし、 $w_0 = (3/2)k_B T$ とします。この場合、 w_0 は系の絶対温度で定まる熱エネルギーに対応します。しかし、上の式のような衝突項を仮定すると、時間と共にキャリア電子の運動エネルギーは、熱平衡状態での熱エネルギーに収束してしまうと予想されます。この場合、電子の平均速度は実質的にゼロとなってしまう、電流が流れない事態に陥ると考えられます。

今回の半導体デバイスシミュレータ作成において、上記の様々な衝突項を仮定して計算を行ったのですが、物理的に意味のある結果は、得られませんでした。

今回の業務において生じた、技術的な疑問点は、上で説明したように、「半導体ダイオードのデバイス・シミュレーションにおいて、どのような衝突項を与えるべきか」となります。

以上