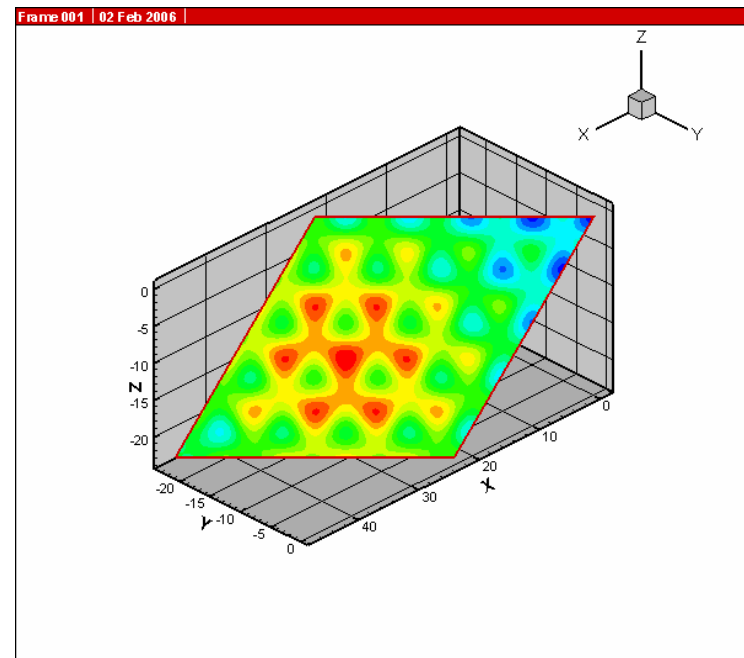
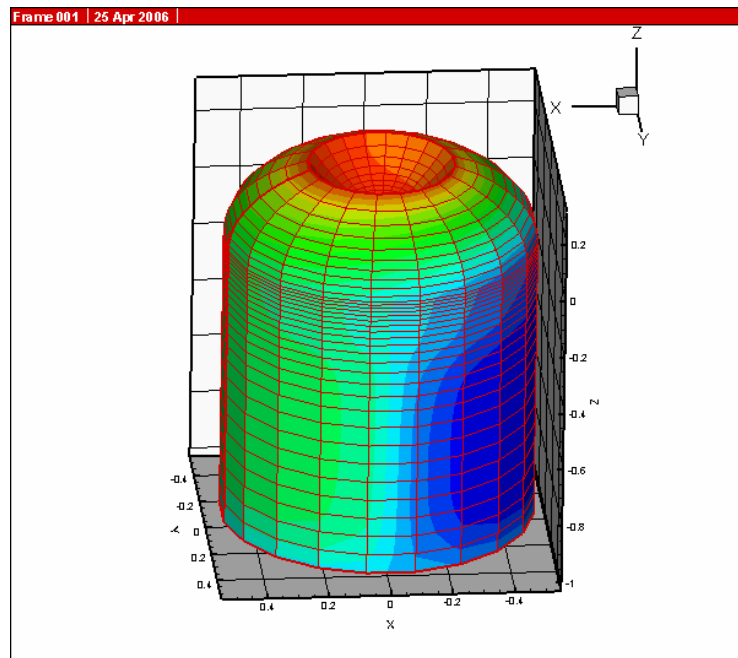


# STMシミュレータのご提案

Advanced Algorithm & Systems

# 作業内容

- 一般曲線座標への対応
- 計算の並列化
- マクロ静電場計算とミクロ電子状態計算の連結
- (電流項の追加(非平衡計算への拡張))



## 1. 一般曲線座標への対応

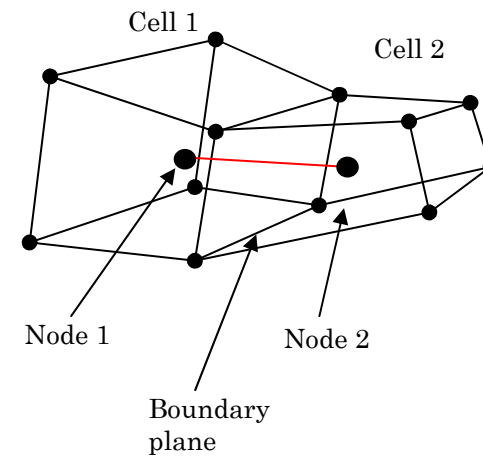
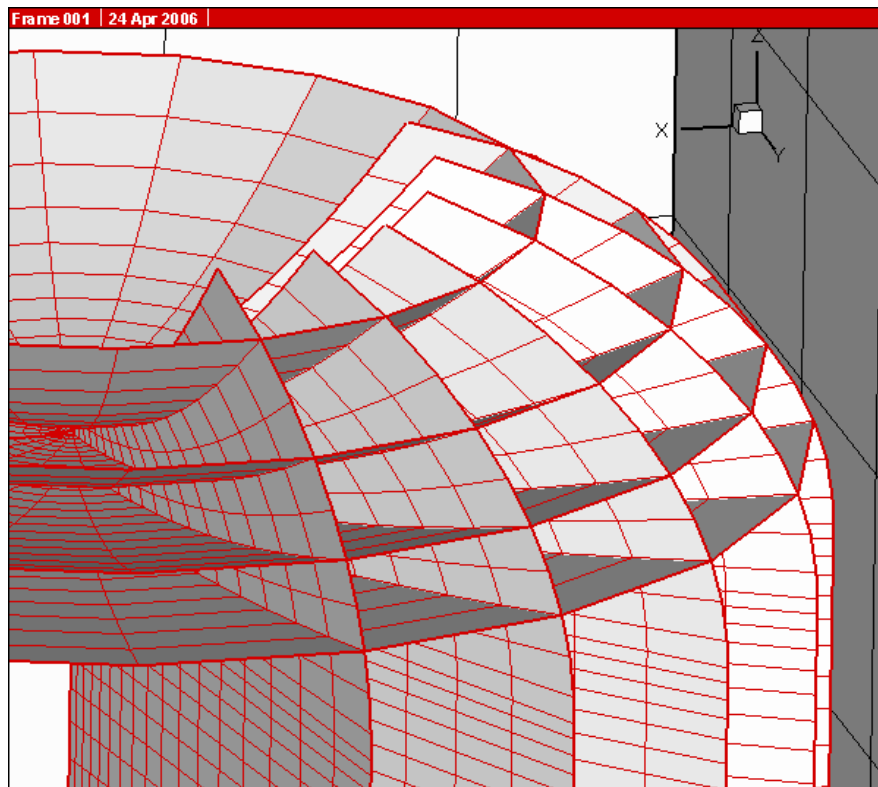
昨年まではグリッドの座標に局所直交性を仮定していた。これを任意の座標を取り扱えるように拡張する。

(一部有限要素的手法を取り入れる。)

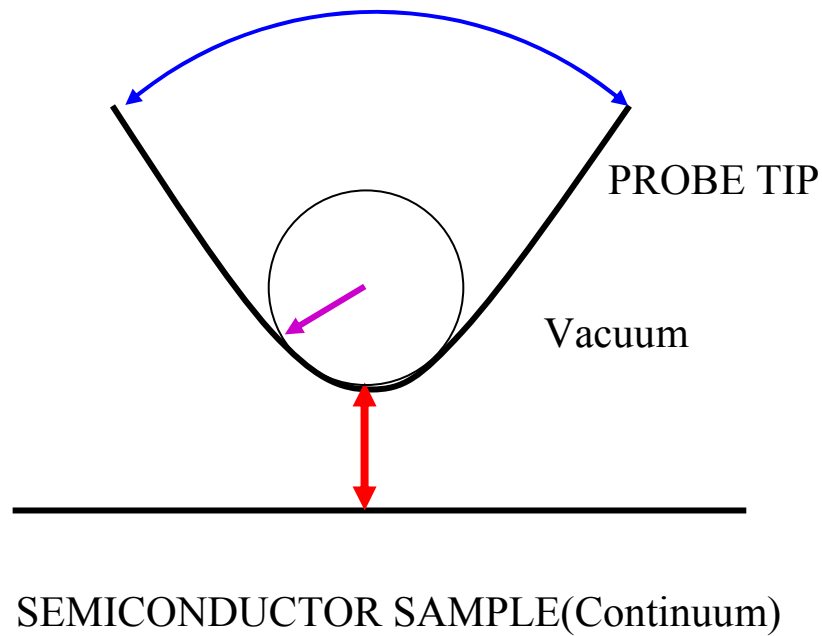
局所直交座標      →      一般曲線座標

## 1.2 グリッドの柔軟な指定

非直交



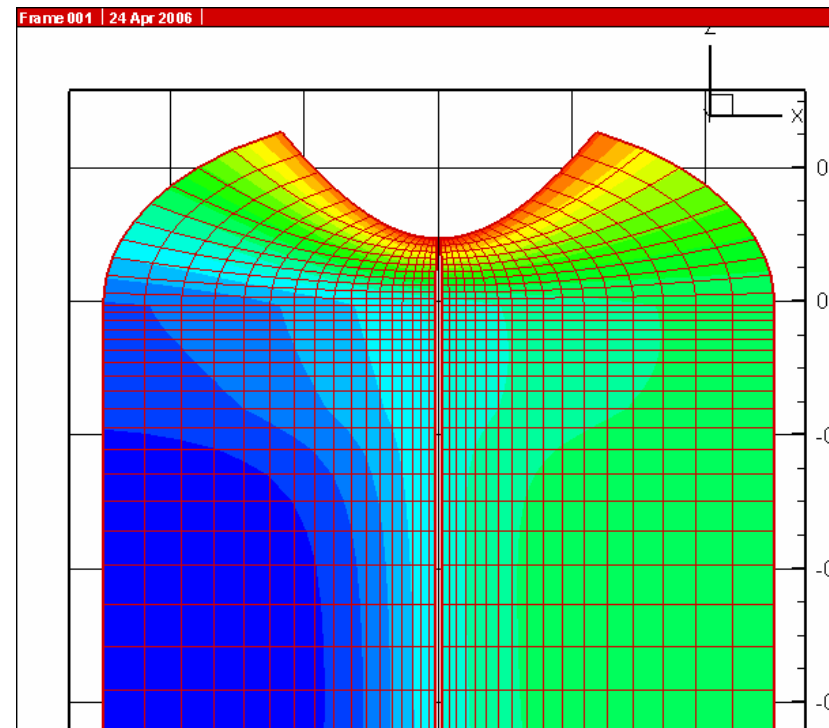
# 1.3 Tip曲率、開き角、Tip-Sample間距離の独立指定



Open angle

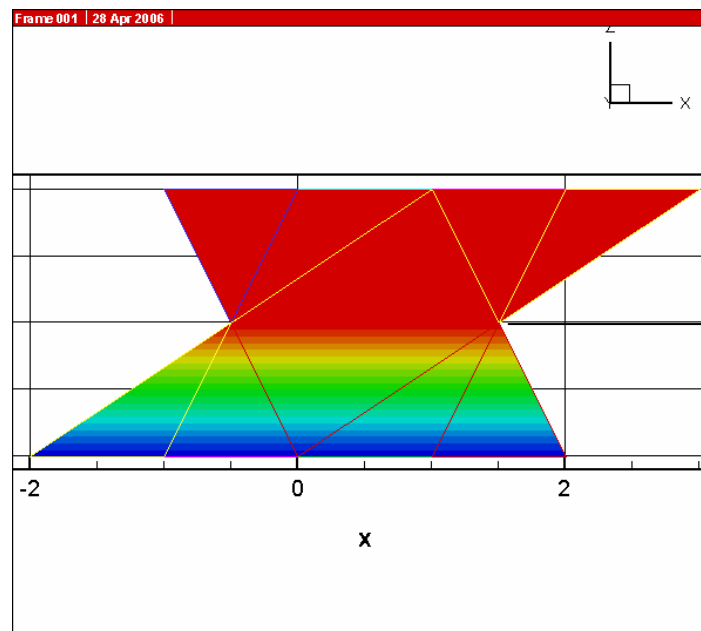
Curvature

Distance



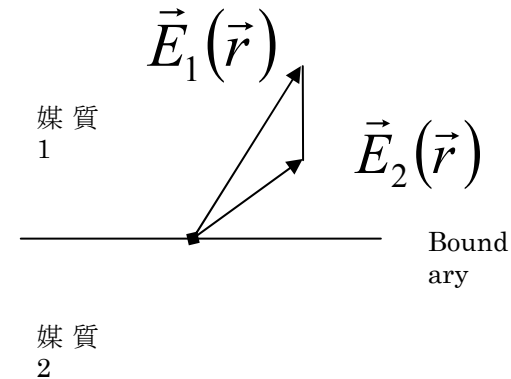
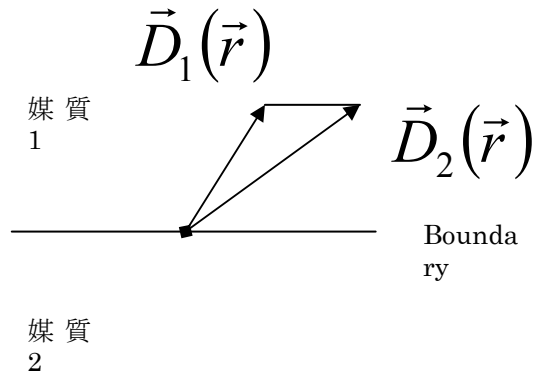
## 1.4 数値スキーム

- セル境界の  $\vec{D}$  の垂直成分を空間一次精度で求める。(フラックス)
- 各cellにおける体積積分を上記フラックスから計算する。



## 1.5 フラックスの求め方

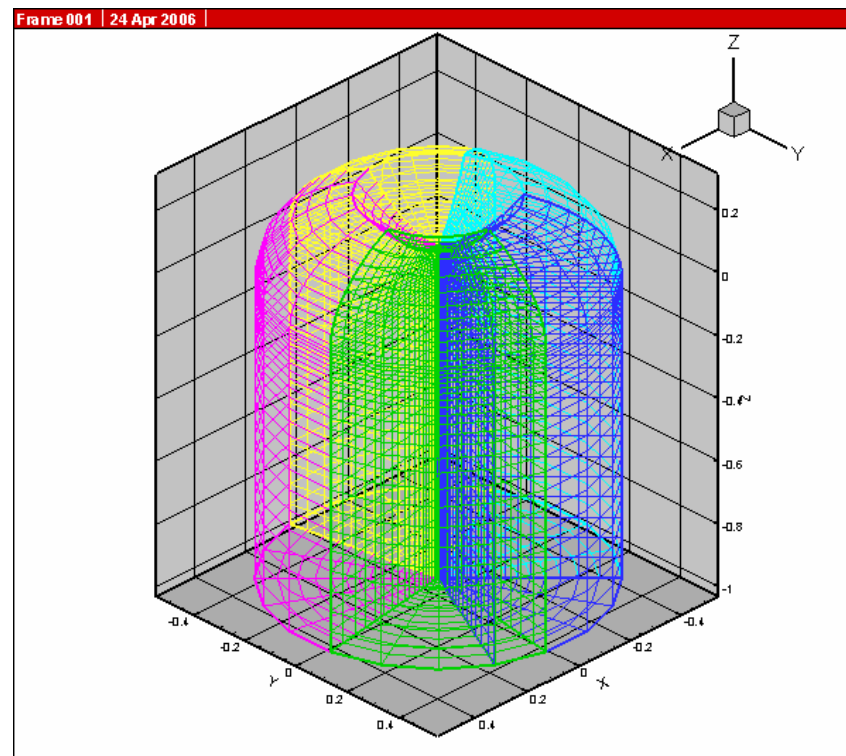
- 各セル境界において境界条件を満たすように電圧を空間1次精度で内挿する。
- 上で求めた電圧からフラックスを計算する。



上記手続きは一意でない

## 2. 計算の並列化

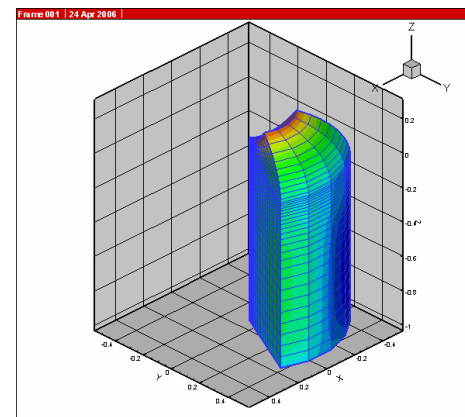
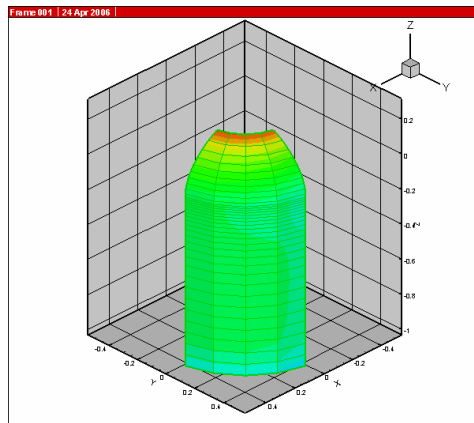
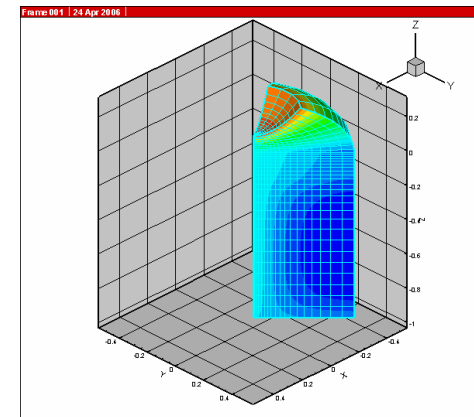
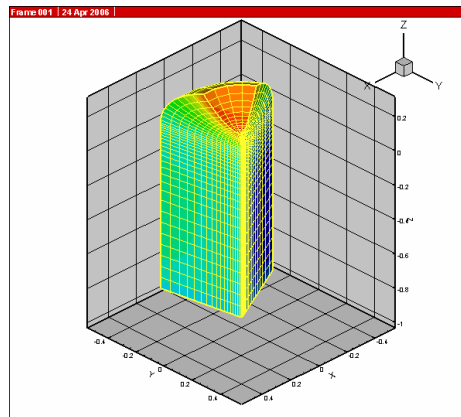
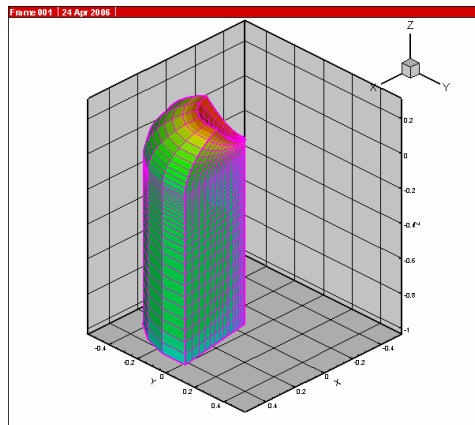
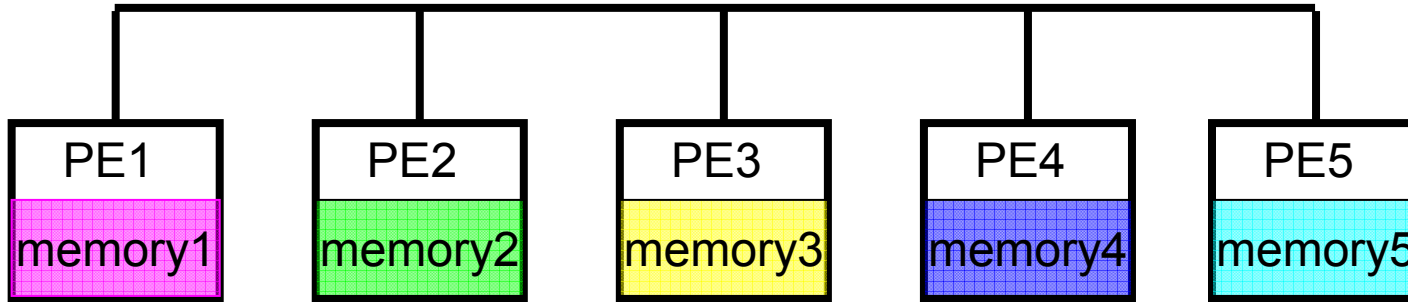
- 計算の大規模化
- 計算の高速化
- 複数ブロックを用いるMulti-Blockに対応。1.とあわせてより柔軟なグリッド形状に対応可能





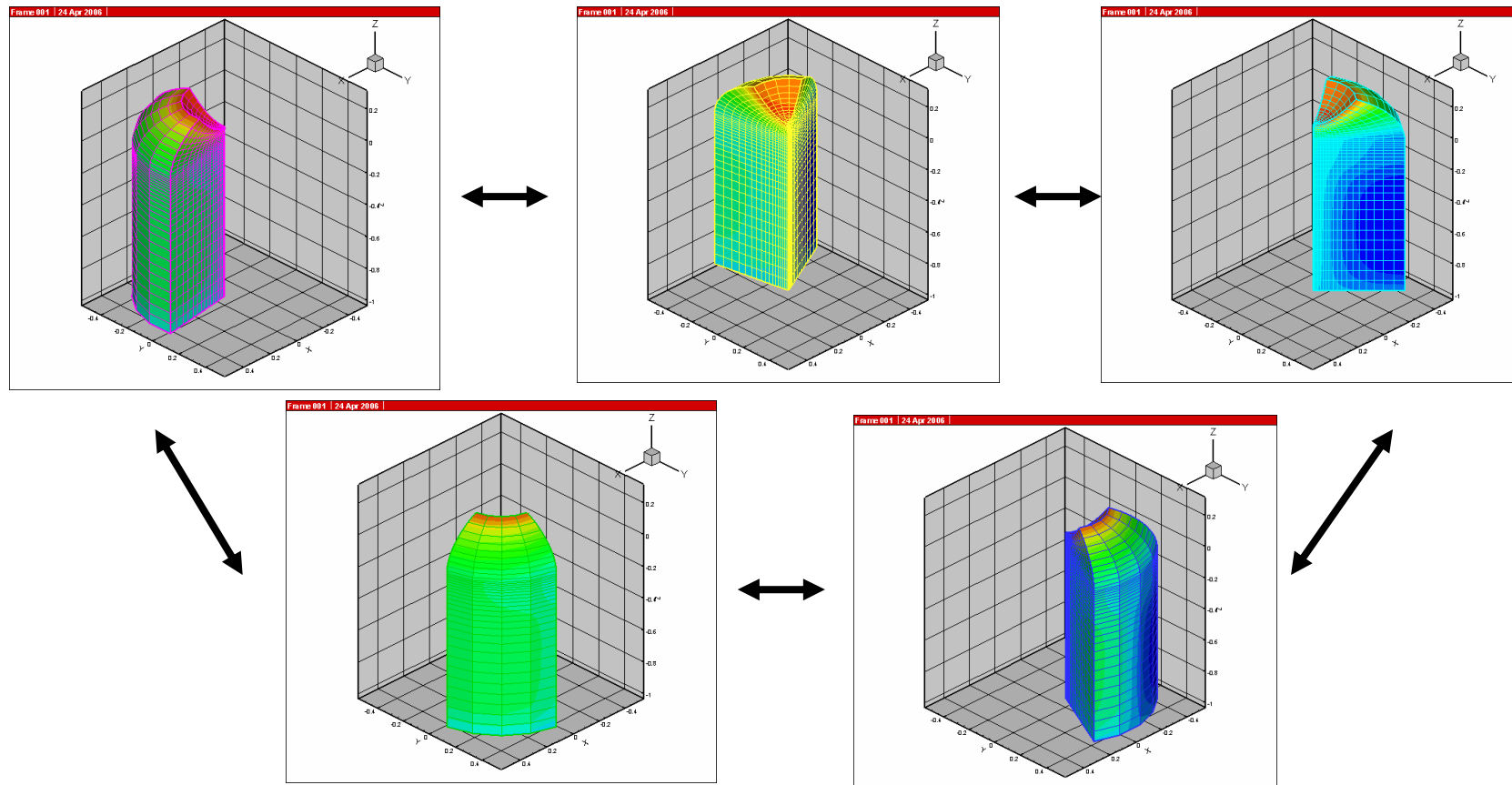
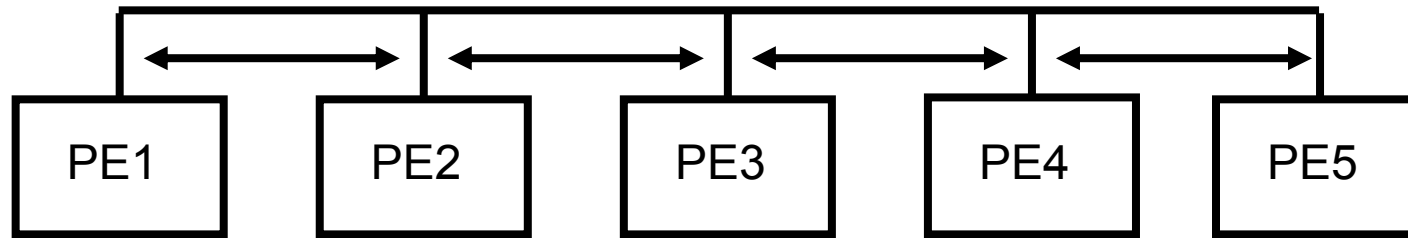
## 2.1 計算の大規模化(完全なメモリ分散)

完全にメモリ分散することにより1PEあたりのメモリ負荷を最小限に抑える。

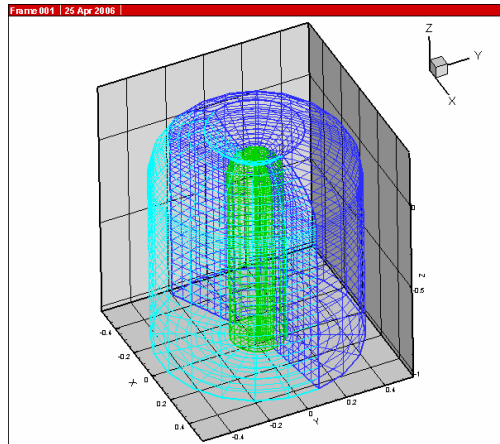


## 2.2 計算の高速化(効率的なアルゴリズム)

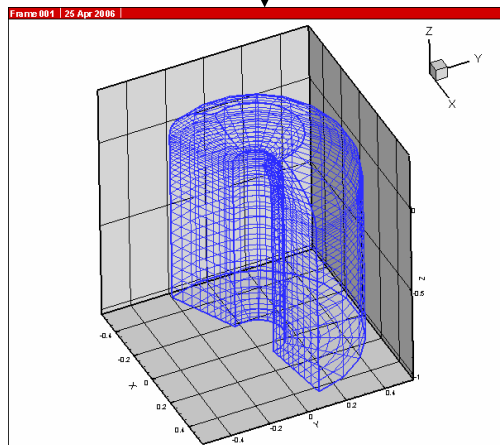
必要最小限のデータのやり取りと最小の計算スケジュールによる高速化の実現



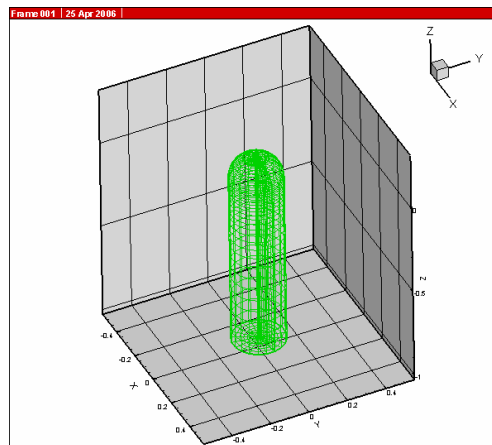
## 2.3 Multi-gridによるグリッドの柔軟化



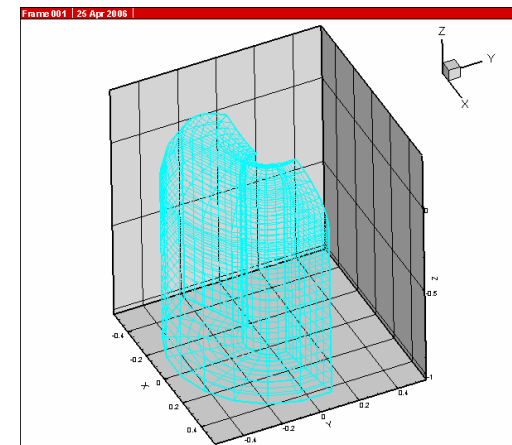
対象に合わせてグリッドの最適化  
p型半導体とn型半導体の境界etc  
Mesh generationの効率化  
場合によっては有限要素法との併用



grid001.fub

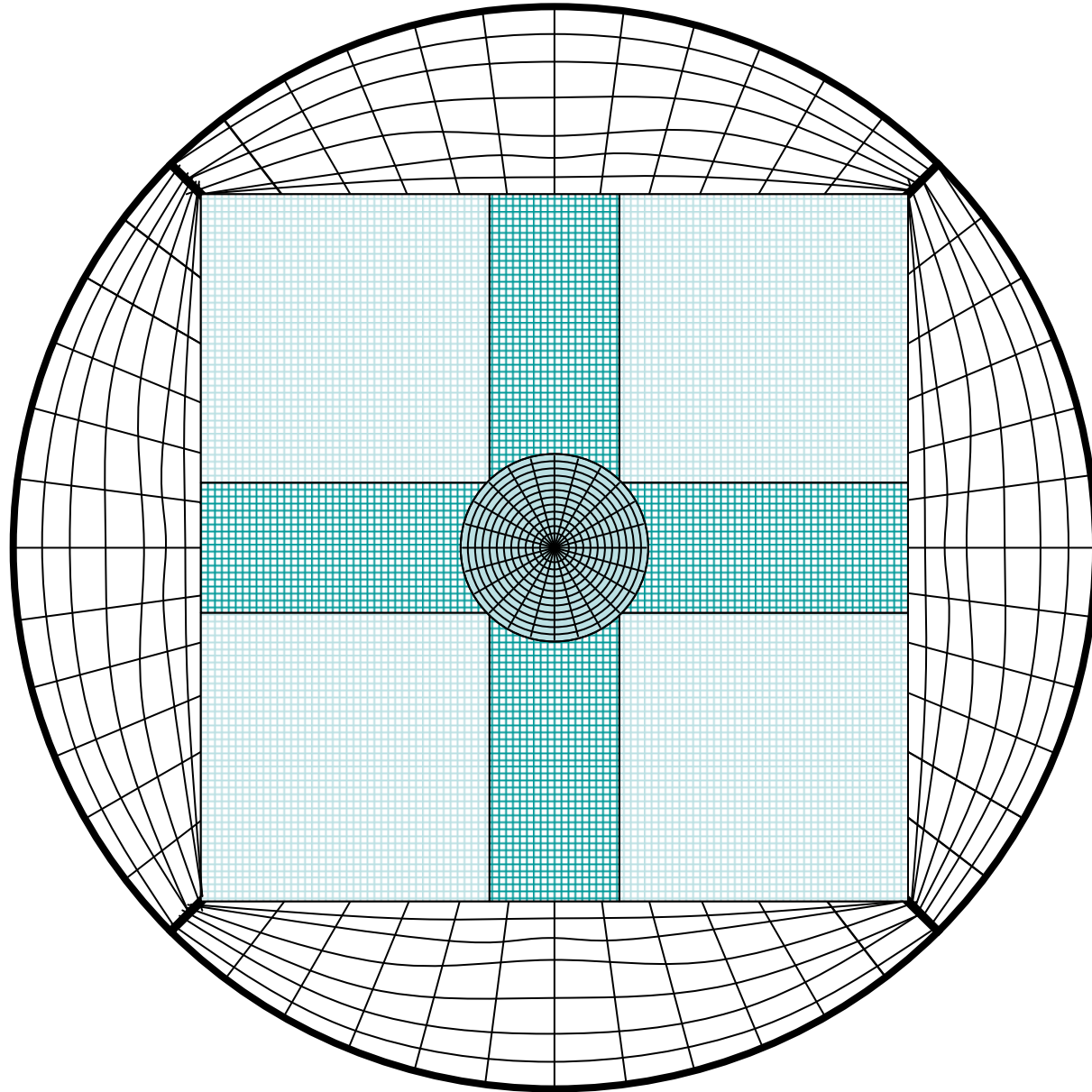


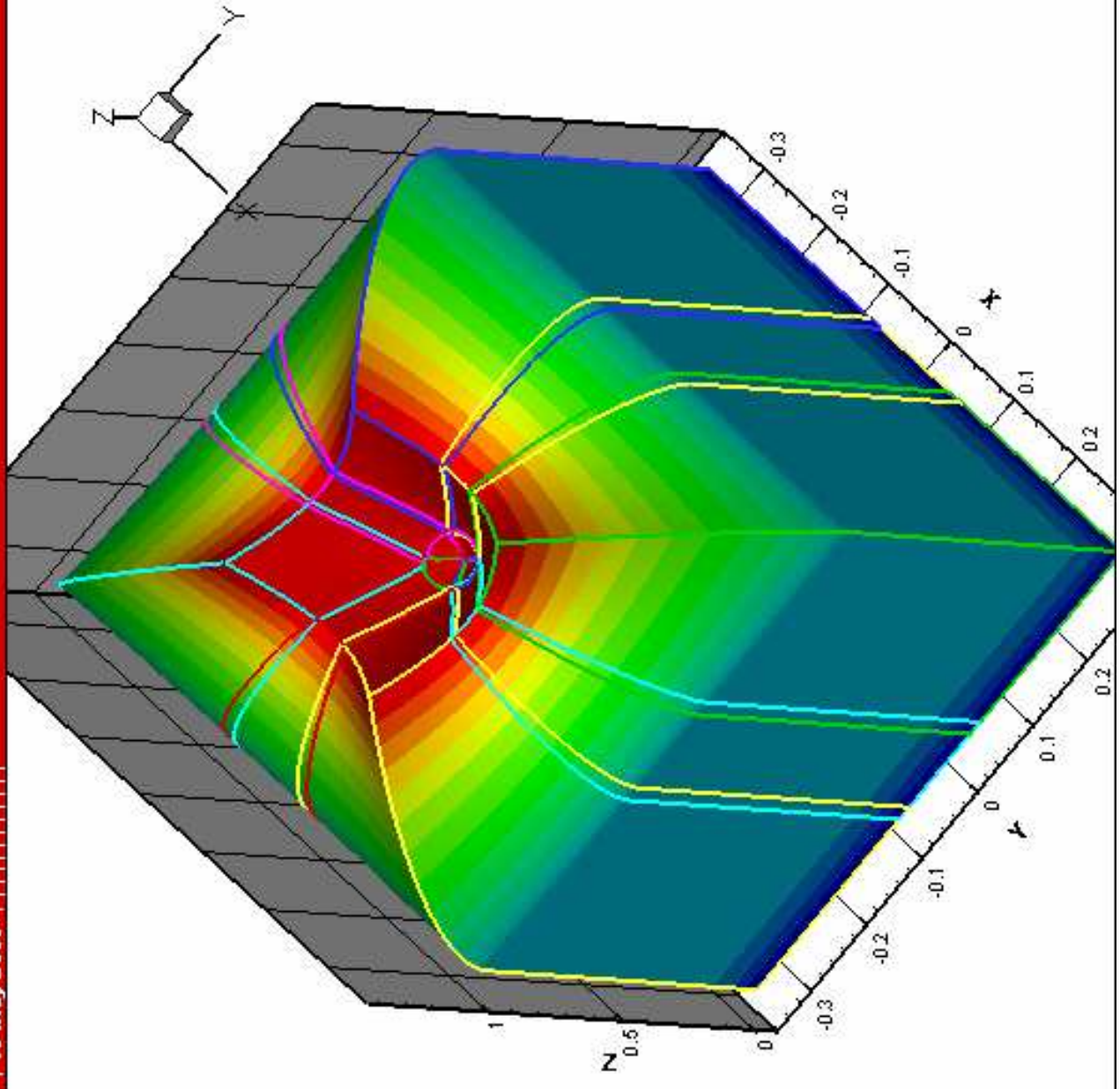
grid002.fub



grid003.fub

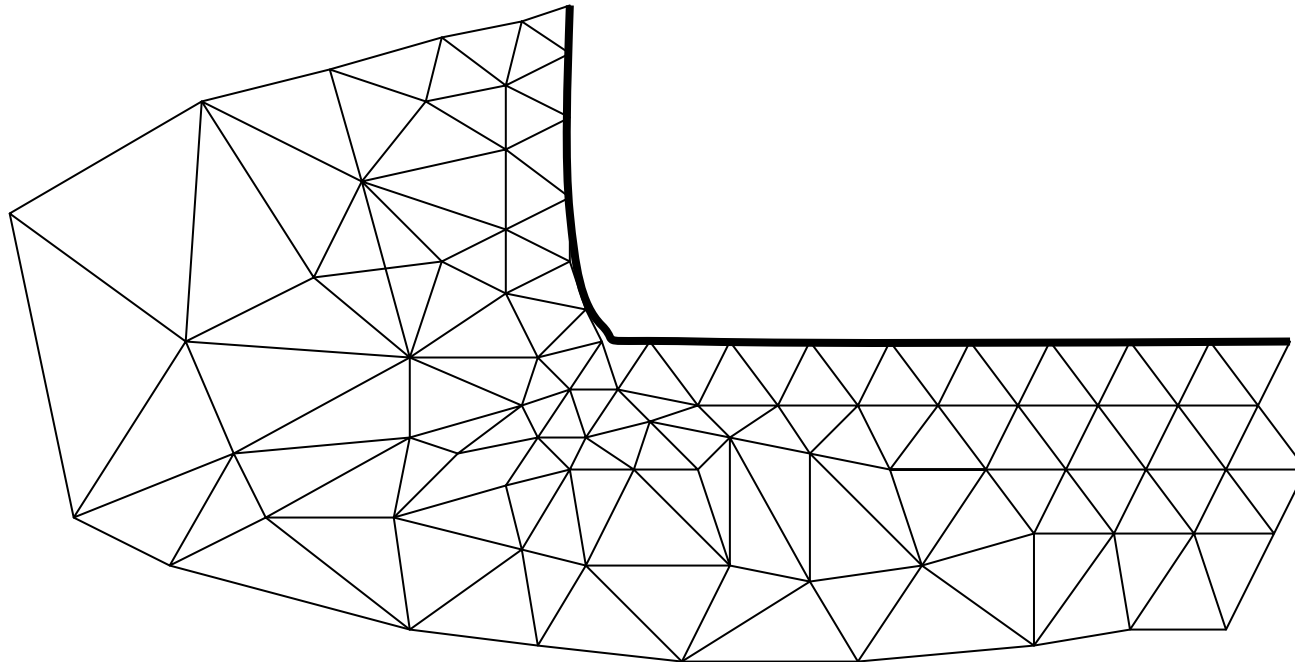
## 2.3.1 Multi-gridの例





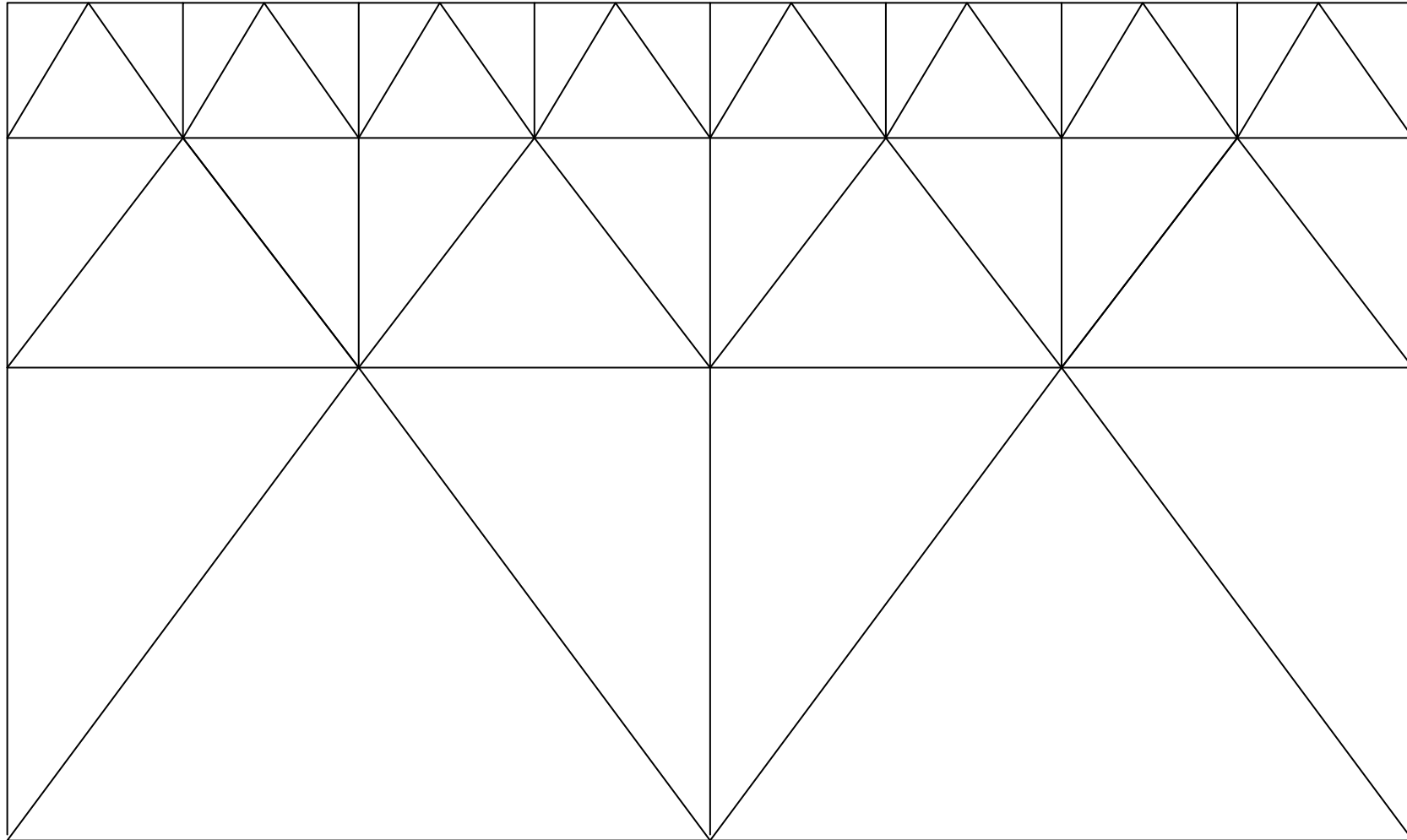
## 2.3.2 Finite element method

- 格子の自動生成
- 並列計算
- 場合によっては広範に導入する



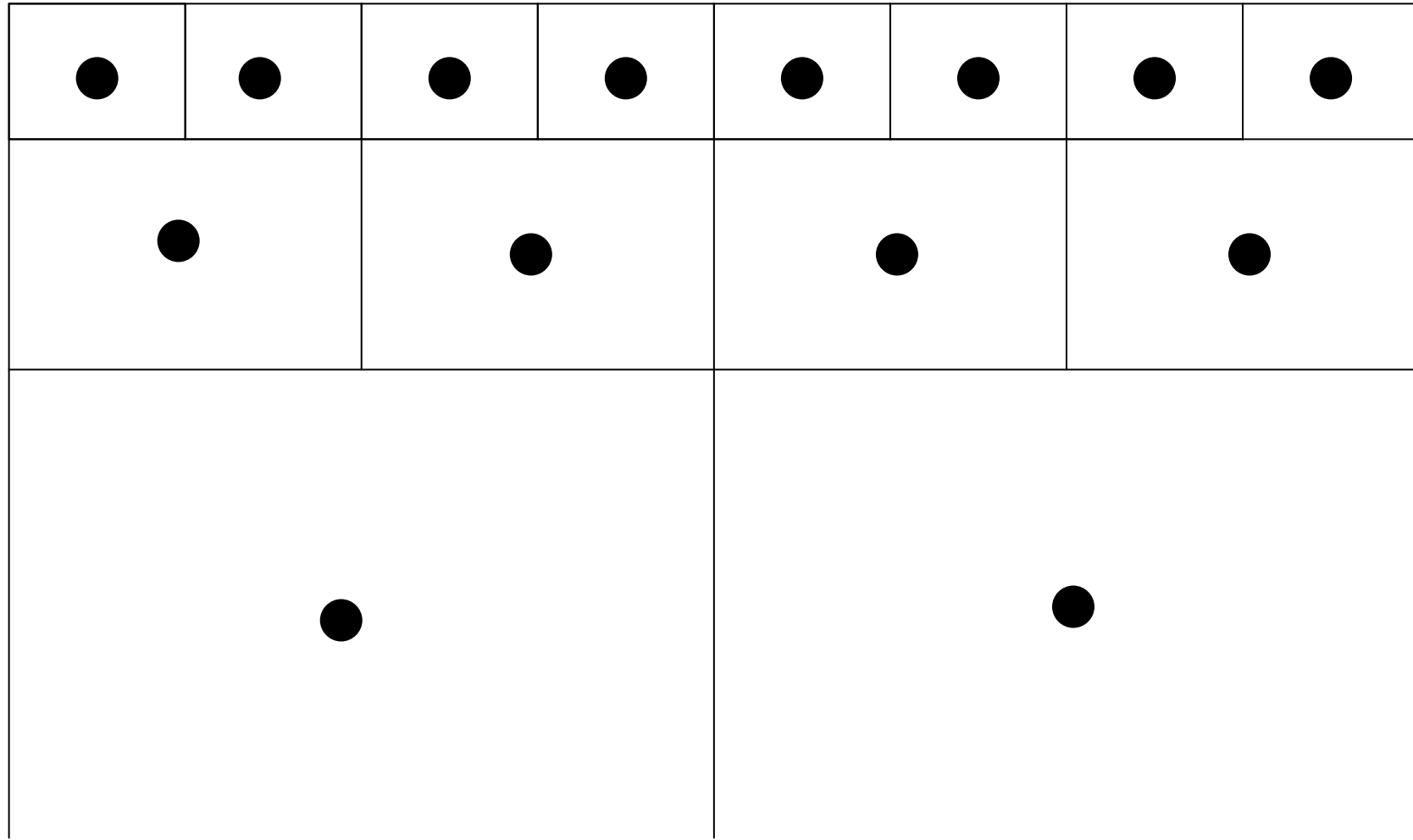
## 2.3.3 Finite element methodの利点

スケールのresolutionの変化に柔軟に対応できる



## 2.3.4 Multi-gridでの対応 (Adapted Mesh Refinement(AMR))

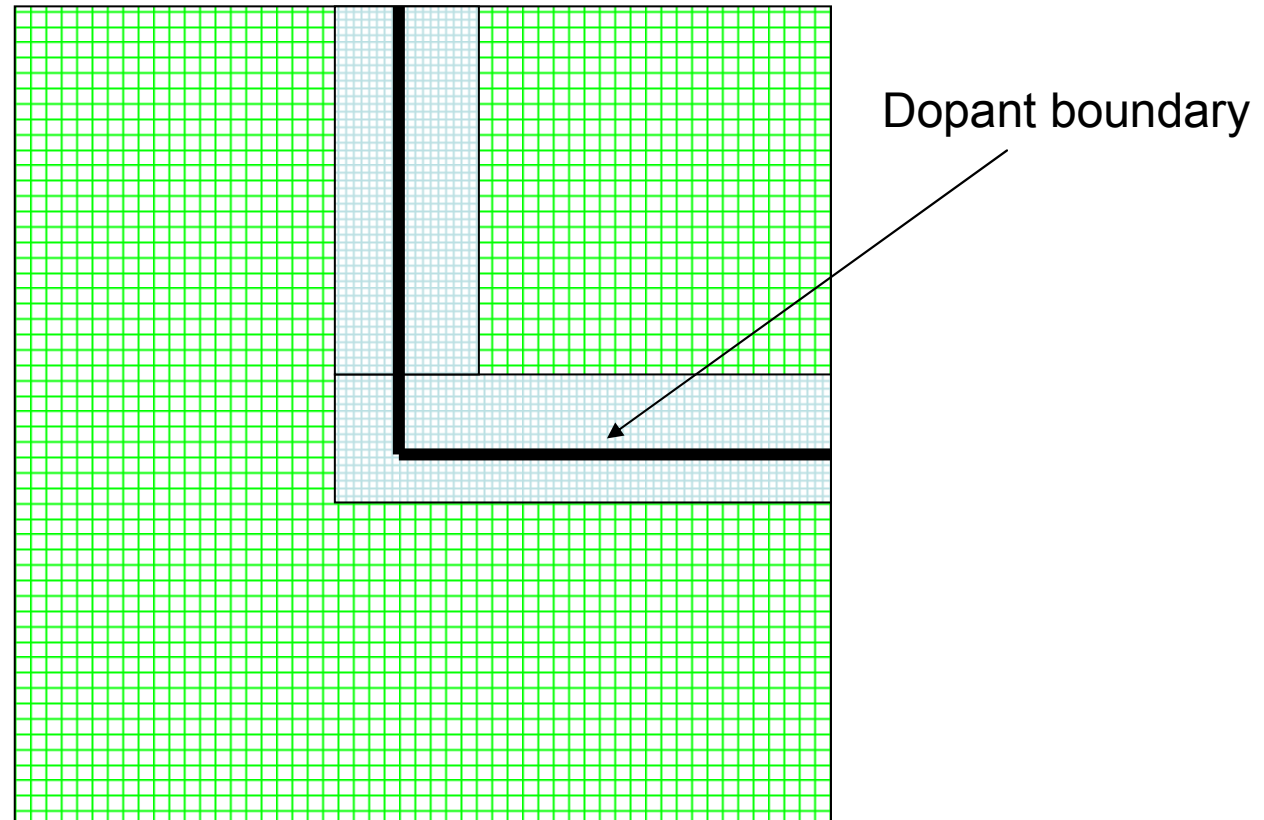
規則IJK格子でResolutionをコントロールするのは比較的困難





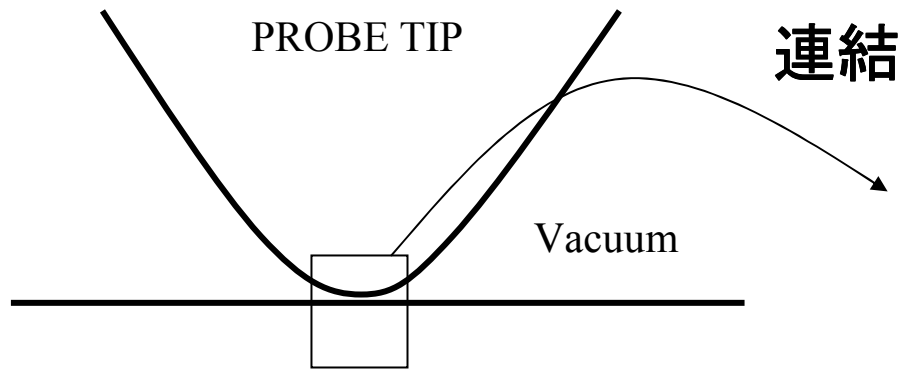
## 2.3.5 Adaptive mesh refinementの例

以下の形でドーパントのプロファイルに対応する



### 3. マクロ静電場計算とミクロ電子状態計算の連結

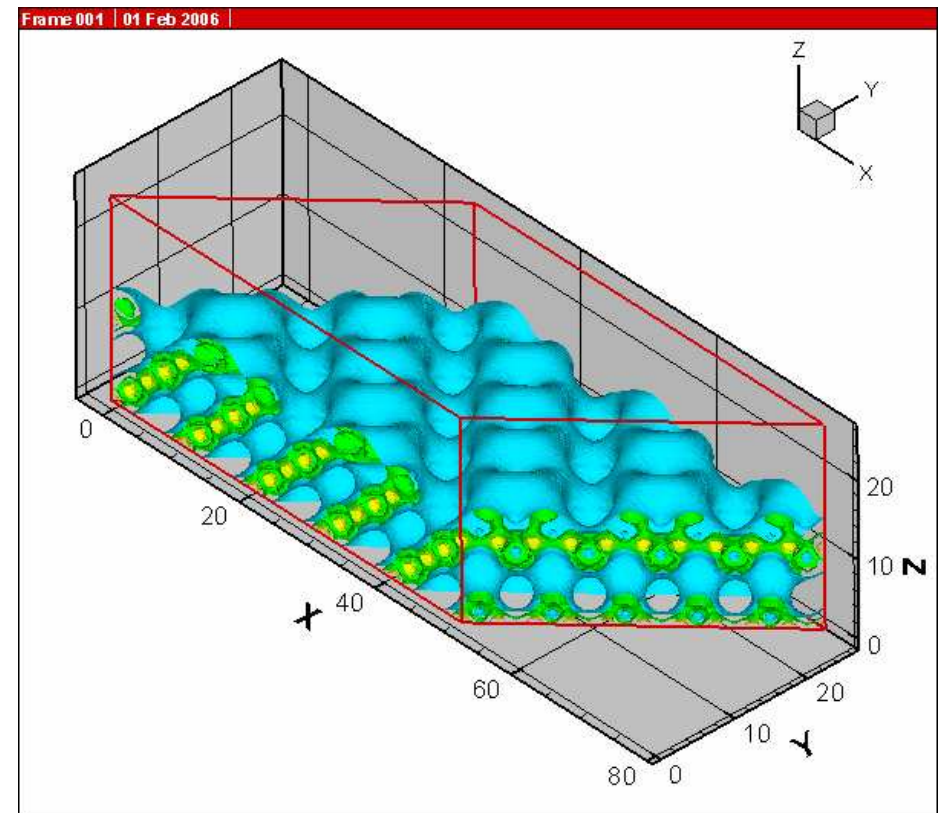
- 効率のよいインターフェースを開発する。



Macroscopic calculation(Continuum)

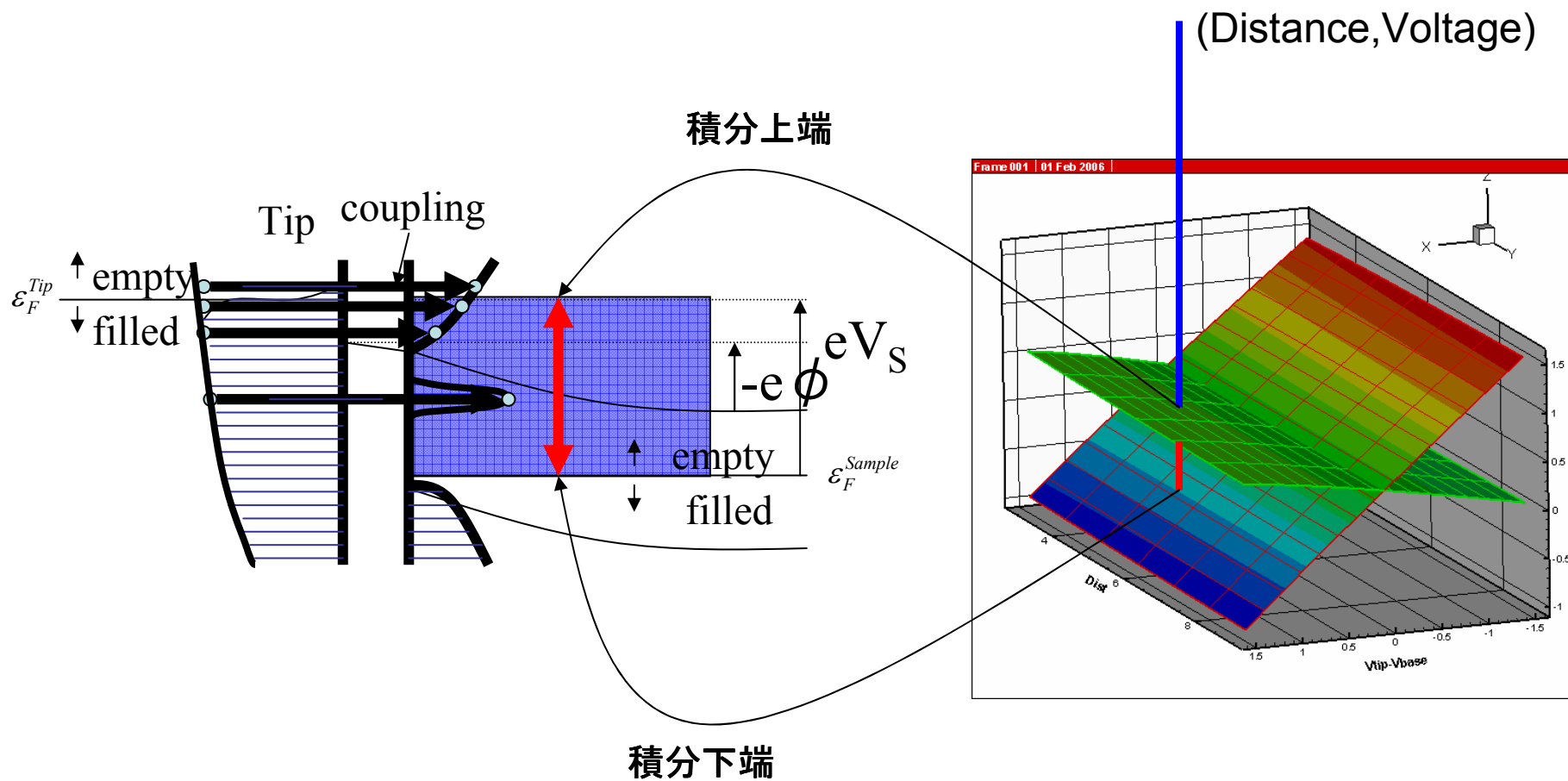
表面誘導電位  
の計算

Microscopic calculation



# 3.1 転送データ

## 積分領域の決定



- $e\phi + eV_s$ 等をさまざまなジオメトリでまとめてマイクロ計算へ送る

## 4. 電流項の追加（非平衡計算への拡張）

- 電極を介した正味の加電圧を加えることができる。
- 半導体を絶縁体で分離できる。

主な目的は2番目のものなので場合によってはよりよい方法で実装する

## 数値計算のスキーム

- Semiconductor devices :  
a numerical approachによるfinite difference  
に基礎を置く。