

半導体デバイス特性への光照射効果の数値計算

三宅 雅保*

Numerical Simulation of Light Illumination Effects on Semiconductor Device Characteristics

Masayasu MIYAKE

ABSTRACT

Light illumination effects on semiconductor device characteristics are investigated by numerical simulation. Numerical solutions for Poisson equation, current equations and continuity equations are obtained using the finite difference method. Depth profiles of potentials, current densities and carrier concentrations are evaluated for Si pn junctions under illumination. Physical mechanisms in semiconductors can be understood referring to calculated results.

キーワード：半導体デバイス，光照射，数値計算，pn接合

Keywords: semiconductor device, light illumination, numerical simulation, pn junction

1. まえがき

半導体レーザー等の光デバイスには直接遷移型の化合物半導体が用いられる。一方，Siは間接遷移型の半導体であるため，発光デバイスとしては用いられない。しかし，Siデバイスに光照射を行うとその特性は大きく変化する。これを積極的に利用したものが，太陽電池，フォトダイオード等である。Siデバイスの主流である大規模集積回路(LSI)はトランジスタを含む回路を集積化したものである。特にMOSトランジスタを集積化したMOSLSIが主流である。このようなMOSデバイスでは，光照射を積極的に利用することはなく，光は照射しない状態で動作させることが基本である。しかし，製作工程の評価を行うときには，組み立てたデバイスではなくて，ウェーハ状態のMOSダイオード，pnダイオード，MOSトランジスタ等の電気的特性を評価

するので，光をしゃ断しないで行わなければならないことがある。そのため，このようなデバイスの電気特性への光照射の効果を定量的に把握しておくことが重要である。

本報告は，このような観点から，Siデバイス特性への光照射効果を数値計算により明らかにするものである。物質の電気的特性は，ポアソンの方程式，電流の式，電荷連続の式の3つの式により記述される。半導体では，キャリアとして電子と正孔の2種類があり，電流の式，電荷連続の式が電子と正孔に対してそれぞれ成立するので，合計5つの微分方程式を連立させて解く必要がある。光照射の効果は電荷連続の式に入る。本報告では，差分法による数値計算を行った。差分法による数値計算プログラムを作り，その収束性を検証した。半導体デバイスの内，pn接合を取り上げ，その電流-電圧特性の数値計算を行い，光照射による電子正孔対の発生がどのよう

*電子・電気工学科

な効果をおよぼすか検討した。その結果から、半導体内部でどのような現象が起きているかについて考察した。

2. 半導体の電気的特性を記述する基本方程式

場所に対する変化が x 方向に 1 次元の場合の半導体の電気的特性は次の微分方程式により表される。

(i) ポアソンの方程式

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = -\frac{q}{\epsilon_0 \epsilon_s} (p - n + N_d - N_a) \quad (1)$$

ここで、 ϕ は電位、 p は正孔濃度、 n は電子濃度、 N_d はドナー濃度、 N_a はアクセプター濃度である。 q は素電荷、 ϵ_0 は真空の誘電率、 ϵ_s は半導体の比誘電率である。

(ii) 電荷連続の式

(a) 正孔に対する式

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -R_p - \frac{1}{q} \frac{\partial J_p}{\partial x} \quad (2)$$

J_p は正孔電流密度、 R_p は正孔の再結合率で (8) 式で与えられる。

光照射により電子正孔対が発生する。この効果はこの式に現れ、電荷の生成率の絶対値を Ge とすると

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -R_p + \frac{Ge}{q} - \frac{1}{q} \frac{\partial J_p}{\partial x} \quad (3)$$

となる。

(b) 電子に対する式

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -R_n + \frac{1}{q} \frac{\partial J_n}{\partial x} \quad (4)$$

J_n は電子電流密度、 R_n は電子の再結合率で (8) 式で与えられる。

光照射を行った場合は

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -R_n + \frac{Ge}{q} + \frac{1}{q} \frac{\partial J_n}{\partial x} \quad (5)$$

となる。

(iii) 電流密度の式

(a) 正孔電流に対する式

$$J_p = -qD_p \frac{\partial p}{\partial x} - q\mu_p p \frac{\partial \phi}{\partial x} \quad (6)$$

D_p は正孔の拡散係数、 μ_p は正孔の移動度である。

(b) 電子電流に対する式

$$J_n = qD_n \frac{\partial n}{\partial x} - q\mu_n n \frac{\partial \phi}{\partial x} \quad (7)$$

D_n は電子の拡散係数、 μ_n は電子の移動度である。

(iv) 生成再結合を表す式

$$R_p = R_n = R = \frac{pn - n_i^2}{\tau_p(n + n_i) + \tau_n(p + n_i)} \quad (8)$$

n_i は真性キャリア濃度、 τ_p は正孔のライフタイム、 τ_n は電子のライフタイムである。

正孔に対する擬フェルミポテンシャルを ϕ_p 、電子に対する擬フェルミポテンシャルを ϕ_n とすれば、 p 、 n は次式となる。

$$p = n_i \exp(-\beta(\phi - \phi_p)) \quad (9)$$

$$n = n_i \exp(\beta(\phi - \phi_n)) \quad (10)$$

ここで、 $\beta = 1/kT$ である。

アインシュタインの関係と (9)、(10) を用いて (6)、(7) を書き直すと

$$J_p = -q\mu_p p \frac{\partial \phi_p}{\partial x} \quad (11)$$

$$J_n = -q\mu_n n \frac{\partial \phi_n}{\partial x} \quad (12)$$

以下、定常状態を扱うものとする、(3)、(5) において時間微分を 0 とおき、さらに (11)、(12) を代入すると

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(p\mu_p \frac{\partial \phi_p}{\partial x} \right) - R + \frac{Ge}{q} = 0 \quad (13)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(-n\mu_n \frac{\partial \phi_n}{\partial x} \right) - R + \frac{Ge}{q} = 0 \quad (14)$$

となる。以上の結果から、現在の問題は (1)、(13)、(14) の 3 つの微分方程式を連立させて解くことに帰着する。また、 R は p 、 n で表され、 p 、 n は (9)、(10) により、 ϕ 、 ϕ_p 、 ϕ_n で表されるので、変数は ϕ 、 ϕ_p 、 ϕ_n の 3 つとなる。つまり、適当な境界条件の下に、場所 x の関数として、 ϕ 、 ϕ_p 、 ϕ_n を求める問題となる。

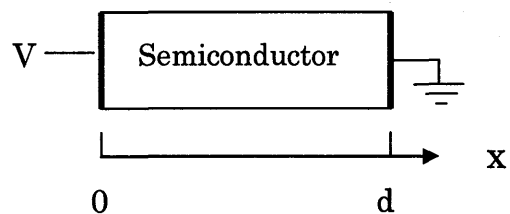


図1 数値計算を行うデバイスの構造

Fig.1 Structure of device for numerical simulation

本報告では図1に示す構造を考える。厚さが d の半導体を考え、深さ方向に x 軸をとる。 $x = 0$ と $x = d$ の位置にオーミック接触の電極がある 2 端子素子である。 x

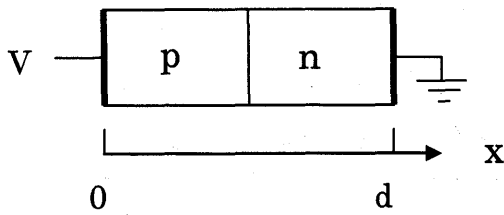


図2 p n 接合
Fig. 2 pn junction

= d の裏面電極を基準にし、x = 0 の表面電極に印加する電圧を V とする。この素子の典型的な例は、図 2 に示す p n 接合である。半導体の電位 ϕ の基準は次のようにする。平衡状態、つまり V = 0 のときのフェルミポテンシャル ϕ_F を 0 とし、これを電位の基準とする。このとき、 $\phi_p = \phi_n = 0$ である。従って、(9)、(10) より、平衡状態で、 $p = n = n_i$ の点の電位が 0 となる。平衡状態での境界 (x = 0 および x = d) での電位 ϕ_{0s} 、 ϕ_{0f} は次式で与えられる

$$\phi_0 = \pm \frac{1}{\beta} \ln \left[\left| \frac{N}{2n_i} \right| + \left(1 + \left(\frac{N}{2n_i} \right)^2 \right)^{1/2} \right] \quad (15)$$

ここで、 $N = N_d - N_a$ であり、x = 0 での N の値を入れたものが ϕ_{0s} 、x = d での N の値を入れたものが ϕ_{0f} である。復号は N が正のとき +、負のとき - をとるものとする。

境界はオーミック接触であるから、境界条件は次のようになる。

x = 0 において

$$\phi = \phi_{0s} + V \quad (16)$$

$$\phi_p = V \quad (17)$$

$$\phi_n = V \quad (18)$$

x = d において

$$\phi = \phi_{0f} \quad (19)$$

$$\phi_p = 0 \quad (20)$$

$$\phi_n = 0 \quad (21)$$

3. 数値計算の方法

差分法による数値計算を行った。[1]、[2] 図 3 に示すように x = 0 から x = d までをメッシュに分割する。

メッシュ点の数を n とする。i 番目のメッシュ点の座標を x_i とすれば、i 番目のメッシュ間隔は $h_i = x_i - x_{i-1}$ となる。x の内、i = 1 から n までがメッシュ点を表し、 x_0 および x_{n+1} が境界点を表す。

(1) を書き直すと

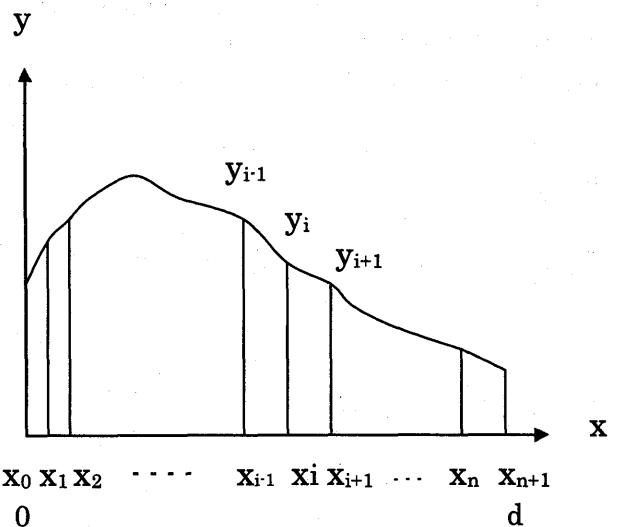


図3 差分法のためのメッシュ分割
Fig. 3 Mesh formulation for finite difference method

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{q}{\epsilon_0 \epsilon_s} (p - n + N_d - N_a) = 0 \quad (22)$$

となる。

ここで、

$$F = \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{q}{\epsilon_0 \epsilon_s} (p - n + N_d - N_a) \quad (23)$$

$$G = \frac{\partial}{\partial x} \left(-n \mu_n \frac{\partial \phi_n}{\partial x} \right) - R + \frac{G_e}{q} \quad (24)$$

$$H = \frac{\partial}{\partial x} \left(p \mu_p \frac{\partial \phi_p}{\partial x} \right) - R + \frac{G_e}{q} \quad (25)$$

とおくと、各メッシュ点で $F = 0$ 、 $G = 0$ 、 $H = 0$ が成立するように $\phi(x)$ 、 $\phi_n(x)$ 、 $\phi_p(x)$ を定めればよい。メッシュ点 i での F、G、H の値を F_i 、 G_i 、 H_i と表す。

メッシュ点 i での ϕ 、 ϕ_n 、 ϕ_p の値を ϕ_i 、 ϕ_{ni} 、 ϕ_{pi} と表し、次式のように、微分を差分で近似する。

$$\left(\frac{d\phi}{dx} \right)_{x_i} \cong \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{x_{i+1} - x_{i-1}} = \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{h_i + h_{i+1}} \quad (26)$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{d^2 \phi}{dx^2} \right)_{x_i} &\cong \frac{\phi'_{i+1/2} - \phi'_{i-1/2}}{x_{i+1/2} - x_{i-1/2}} \\ &= \frac{2}{h_i h_{i+1} (h_i + h_{i+1})} (h_i \phi_{i+1} - (h_i + h_{i+1}) \phi_i + h_{i+1} \phi_{i-1}) \end{aligned} \quad (27)$$

ϕ_n, ϕ_p の微分に対しても同様な式が成立する。

(23), (24), (25) 式中の微分を差分で近似すると F_i, G_i, H_i は次式で近似できる。ただし、ここでは移動度は場所によらず一定とした。一定でない場合もほとんど同様に扱うことができる。

$$F_i \cong \frac{2}{h_i h_{i+1} (h_i + h_{i+1})} (h_i \phi_{i+1} - (h_i + h_{i+1}) \phi_i + h_{i+1} \phi_{i-1}) + \frac{q}{\epsilon_0 \epsilon_s} (n_i \exp(-\beta(\phi_i - \phi_{pi})) - n_i \exp(\beta(\phi_i - \phi_{ni})) + N_{di} - N_{ai}) \quad (28)$$

$$G = -\mu_n \frac{\partial}{\partial x} \left(n \frac{\partial \phi_n}{\partial x} \right) - R + \frac{Ge}{q} = -\mu_n \left(n \frac{\partial^2 \phi_n}{\partial x^2} + \frac{\partial n}{\partial x} \frac{\partial \phi_n}{\partial x} \right) - R + \frac{Ge}{q} \quad (29)$$

$$H = \mu_p \frac{\partial}{\partial x} \left(p \frac{\partial \phi_p}{\partial x} \right) - R + \frac{Ge}{q} = \mu_p \left(p \frac{\partial^2 \phi_p}{\partial x^2} + \frac{\partial p}{\partial x} \frac{\partial \phi_p}{\partial x} \right) - R + \frac{Ge}{q} \quad (30)$$

より

$$G_i \cong -\frac{\mu_n n_i}{h_i h_{i+1}} \left[\frac{\exp(\beta(\phi_i - \phi_{ni}))}{h_i h_{i+1}} \frac{2(h_i \phi_{n(i+1)} - (h_i + h_{i+1}) \phi_{ni} + h_{i+1} \phi_{n(i-1)}))}{(h_i + h_{i+1})^2} \right] - n_i \frac{\exp(\beta(\phi_{pi} - \phi_{ni})) - 1}{\tau_p (\exp(\beta(\phi_i - \phi_{ni})) + 1) + \tau_n (\exp(-\beta(\phi_i - \phi_{pi})) + 1)} + \frac{Ge}{q} \quad (31)$$

$$H_i \cong \frac{\mu_p n_i}{h_i h_{i+1}} \left[\frac{\exp(-\beta(\phi_i - \phi_{pi}))}{h_i h_{i+1}} \frac{2(h_i \phi_{p(i+1)} - (h_i + h_{i+1}) \phi_{pi} + h_{i+1} \phi_{p(i-1)}))}{(h_i + h_{i+1})^2} \right] - n_i \frac{\exp(\beta(\phi_{pi} - \phi_{ni})) - 1}{\tau_p (\exp(\beta(\phi_i - \phi_{ni})) + 1) + \tau_n (\exp(-\beta(\phi_i - \phi_{pi})) + 1)} + \frac{Ge}{q} \quad (32)$$

結局、問題は (28), (31), (32) 式から境界条件を満足する次の3つのベクトルを求めることに帰着する。

$$\psi = (\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_i, \dots, \phi_{n-1}, \phi_n) \quad (33)$$

$$\phi_n = (\phi_{n1}, \phi_{n2}, \dots, \phi_{ni}, \dots, \phi_{n(n-1)}, \phi_{nn}) \quad (34)$$

$$\phi_p = (\phi_{p1}, \phi_{p2}, \dots, \phi_{pi}, \dots, \phi_{p(n-1)}, \phi_{pn}) \quad (35)$$

このために、ある初期解 $\psi(0), \phi_n(0), \phi_p(0)$ を与え、

ニュートンの方法により近似の度合いを上げていく。k 次の近似解と (k+1) 次の近似解の関係は

$$\psi^{(k+1)} = \psi^{(k)} + d\psi \quad (36)$$

$$\phi_n^{(k+1)} = \phi_n^{(k)} + d\phi_n \quad (37)$$

$$\phi_p^{(k+1)} = \phi_p^{(k)} + d\phi_p \quad (38)$$

であるとする、 $d\psi, d\phi_n, d\phi_p$ は、テーラー展開の一次の項のみを考えると、次の関係式を満足する。ただし、この式中のベクトル要素、行列要素は k 次の近似解の値である。

$$\begin{pmatrix} F_1 \\ F_2 \\ - \\ - \\ F_i \\ - \\ F_{n-1} \\ F_n \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial \phi_1} & \frac{\partial F_1}{\partial \phi_2} & \dots & \frac{\partial F_1}{\partial \phi_i} & \dots & \frac{\partial F_1}{\partial \phi_{n-1}} & \frac{\partial F_1}{\partial \phi_n} \\ \frac{\partial F_2}{\partial \phi_1} & \frac{\partial F_2}{\partial \phi_2} & \dots & \frac{\partial F_2}{\partial \phi_i} & \dots & \frac{\partial F_2}{\partial \phi_{n-1}} & \frac{\partial F_2}{\partial \phi_n} \\ - & - & \dots & - & \dots & - & - \\ - & - & \dots & - & \dots & - & - \\ \frac{\partial F_i}{\partial \phi_1} & \frac{\partial F_i}{\partial \phi_2} & \dots & \frac{\partial F_i}{\partial \phi_i} & \dots & \frac{\partial F_i}{\partial \phi_{n-1}} & \frac{\partial F_i}{\partial \phi_n} \\ - & - & \dots & - & \dots & - & - \\ \frac{\partial F_{n-1}}{\partial \phi_1} & \frac{\partial F_{n-1}}{\partial \phi_2} & \dots & \frac{\partial F_{n-1}}{\partial \phi_i} & \dots & \frac{\partial F_{n-1}}{\partial \phi_{n-1}} & \frac{\partial F_{n-1}}{\partial \phi_n} \\ \frac{\partial F_n}{\partial \phi_1} & \frac{\partial F_n}{\partial \phi_2} & \dots & \frac{\partial F_n}{\partial \phi_i} & \dots & \frac{\partial F_n}{\partial \phi_{n-1}} & \frac{\partial F_n}{\partial \phi_n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d\phi_1 \\ d\phi_2 \\ - \\ - \\ d\phi_i \\ - \\ d\phi_{n-1} \\ d\phi_n \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial \phi_{n1}} & \frac{\partial F_1}{\partial \phi_{n2}} & \dots & \frac{\partial F_1}{\partial \phi_{ni}} & \dots & \frac{\partial F_1}{\partial \phi_{n(n-1)}} & \frac{\partial F_1}{\partial \phi_{nn}} \\ \frac{\partial F_2}{\partial \phi_{n1}} & \frac{\partial F_2}{\partial \phi_{n2}} & \dots & \frac{\partial F_2}{\partial \phi_{ni}} & \dots & \frac{\partial F_2}{\partial \phi_{n(n-1)}} & \frac{\partial F_2}{\partial \phi_{nn}} \\ - & - & \dots & - & \dots & - & - \\ - & - & \dots & - & \dots & - & - \\ \frac{\partial F_i}{\partial \phi_{n1}} & \frac{\partial F_i}{\partial \phi_{n2}} & \dots & \frac{\partial F_i}{\partial \phi_{ni}} & \dots & \frac{\partial F_i}{\partial \phi_{n(n-1)}} & \frac{\partial F_i}{\partial \phi_{nn}} \\ - & - & \dots & - & \dots & - & - \\ \frac{\partial F_{n-1}}{\partial \phi_{n1}} & \frac{\partial F_{n-1}}{\partial \phi_{n2}} & \dots & \frac{\partial F_{n-1}}{\partial \phi_{ni}} & \dots & \frac{\partial F_{n-1}}{\partial \phi_{n(n-1)}} & \frac{\partial F_{n-1}}{\partial \phi_{nn}} \\ \frac{\partial F_n}{\partial \phi_{n1}} & \frac{\partial F_n}{\partial \phi_{n2}} & \dots & \frac{\partial F_n}{\partial \phi_{ni}} & \dots & \frac{\partial F_n}{\partial \phi_{n(n-1)}} & \frac{\partial F_n}{\partial \phi_{nn}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d\phi_{n1} \\ d\phi_{n2} \\ - \\ - \\ d\phi_{ni} \\ - \\ d\phi_{n(n-1)} \\ d\phi_{nn} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial \phi_{p1}} & \frac{\partial F_1}{\partial \phi_{p2}} & \dots & \frac{\partial F_1}{\partial \phi_{pi}} & \dots & \frac{\partial F_1}{\partial \phi_{p(n-1)}} & \frac{\partial F_1}{\partial \phi_{pn}} \\ \frac{\partial F_2}{\partial \phi_{p1}} & \frac{\partial F_2}{\partial \phi_{p2}} & \dots & \frac{\partial F_2}{\partial \phi_{pi}} & \dots & \frac{\partial F_2}{\partial \phi_{p(n-1)}} & \frac{\partial F_2}{\partial \phi_{pn}} \\ - & - & \dots & - & \dots & - & - \\ - & - & \dots & - & \dots & - & - \\ \frac{\partial F_i}{\partial \phi_{p1}} & \frac{\partial F_i}{\partial \phi_{p2}} & \dots & \frac{\partial F_i}{\partial \phi_{pi}} & \dots & \frac{\partial F_i}{\partial \phi_{p(n-1)}} & \frac{\partial F_i}{\partial \phi_{pn}} \\ - & - & \dots & - & \dots & - & - \\ \frac{\partial F_{n-1}}{\partial \phi_{p1}} & \frac{\partial F_{n-1}}{\partial \phi_{p2}} & \dots & \frac{\partial F_{n-1}}{\partial \phi_{pi}} & \dots & \frac{\partial F_{n-1}}{\partial \phi_{p(n-1)}} & \frac{\partial F_{n-1}}{\partial \phi_{pn}} \\ \frac{\partial F_n}{\partial \phi_{p1}} & \frac{\partial F_n}{\partial \phi_{p2}} & \dots & \frac{\partial F_n}{\partial \phi_{pi}} & \dots & \frac{\partial F_n}{\partial \phi_{p(n-1)}} & \frac{\partial F_n}{\partial \phi_{pn}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d\phi_{p1} \\ d\phi_{p2} \\ - \\ - \\ d\phi_{pi} \\ - \\ d\phi_{p(n-1)} \\ d\phi_{pn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ - \\ - \\ 0 \\ - \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (39)$$

上式を簡単に次のように表すことにする。

$$F_i + \sum_{j=1}^n \frac{\partial F_i}{\partial \phi_j} d\phi_j + \sum_{j=1}^n \frac{\partial F_i}{\partial \phi_{nj}} d\phi_{nj} + \sum_{j=1}^n \frac{\partial F_i}{\partial \phi_{pj}} d\phi_{pj} = 0$$

$$(i = 1, \dots, n) \quad (40)$$

同様に, G_i, H_i に対しては

$$G_i + \sum_{j=1}^n \frac{\partial G_i}{\partial \phi_j} d\phi_j + \sum_{j=1}^n \frac{\partial G_i}{\partial \phi_{nj}} d\phi_{nj} + \sum_{j=1}^n \frac{\partial G_i}{\partial \phi_{pj}} d\phi_{pj} = 0$$

$$(i = 1, \dots, n) \quad (41)$$

$$H_i + \sum_{j=1}^n \frac{\partial H_i}{\partial \phi_j} d\phi_j + \sum_{j=1}^n \frac{\partial H_i}{\partial \phi_{nj}} d\phi_{nj} + \sum_{j=1}^n \frac{\partial H_i}{\partial \phi_{pj}} d\phi_{pj} = 0$$

$$(i = 1, \dots, n) \quad (42)$$

これらの式を連立させて解くと, $d\psi, d\phi_n, d\phi_p$ を求めることができる. すなわち, $(k+1)$ 次の近似解を求めることができる. これを収束するまで繰り返し行うことにより, 数値解を求めることができる. (28), (31), (32) 式からわかるように, F_i, G_i, H_i には, 多くても $i-1, i, i+1$ の3点の情報しか含まれないから, (40), (41), (42) 式中の行列は, 高々対角要素とその上と下の成分しかない tri-diagonal 行列になる. 従って, 逆行列の計算は簡単になる.

初期解の与え方について述べる. まず, 平衡状態, すなわち印加電圧が0で光照射がないときの解を初期解とした. 平衡状態の解は, 全てのメッシュ点で $\phi_{ni}=0, \phi_{pi}=0$ であり, また, ϕ_i はポアソンの方程式のみを数値計算で解くことにより簡単に計算できる. 次に, 光照射の項を考慮するとともに, 印加電圧が0でないときは, ある小さい値で少しずつ変化させた. 具体的には0.02~0.05Vの幅とした. そして, 印加電圧を変化させる前の解を次の印加電圧のときの初期解として計算した.

4. 数値計算の結果

4.1 計算したpn接合の構造等

ここでは, 厚さが $1\mu\text{m}$ のpn接合について計算した. 材料はSiとし, 比誘電率は11.8とした. 接合位置は深さが $0.5\mu\text{m}$ とし, 表面側がp形層とした. また, プログラムは任意の濃度分布について計算できるが, 簡単のために, ここでは, p形層, n形層それぞれの不純物濃度は深さ方向に一定とした. また, メッシュ点の数は99とし, 分割は等分割とした. 従って, メッシュ間隔は 100\AA となる. キャリヤ移動度の電界依存性は無視し, 一定とした. 電子の移動度は $1000\text{ cm}^2/\text{Vs}$, 正孔の移動度は $500\text{ cm}^2/\text{Vs}$ とした. キャリヤのライフタイムは電子, 正孔とも等しいとし, 種々の値に対して計算した.

4.2 光照射がない場合

光照射がない基本的なpn接合について数値計算した

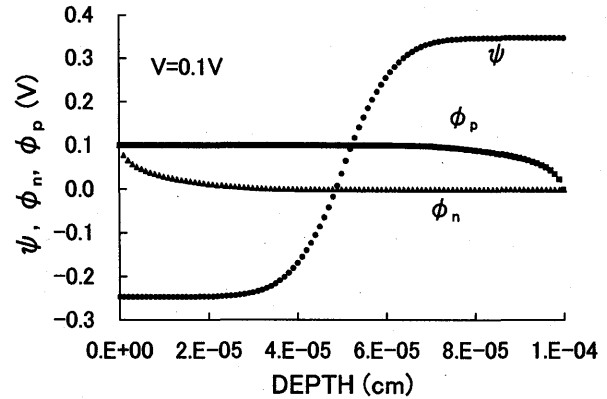


図4 電位と擬フェルミポテンシャルの深さ方向分布
Fig. 4 Depth profiles of potential and pseudo fermi potentials

結果を述べる. p形層の不純物濃度 $N_a = 1 \times 10^{16}$

cm^{-3} , n形層の不純物濃度 $N_d = 1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ とし,

キャリヤのライフタイムを $1\mu\text{s}$ とした. 印加電圧 $V = 0.1\text{ V}$ のときの深さ方向の ϕ, ϕ_n, ϕ_p の変化を図4に示す. これは順方向にバイアスしたpn接合であり, 接合の全体にわたって ϕ_p の方が ϕ_n より大きくなっており, ほとんどの部分で $\phi_p - \phi_n = 0.1\text{ V}$ になっている. 裏面電極, 表面電極では両者は一致する境界条件があるので, 両境界の近傍で両者は差が小さくなっている. キャリヤの拡散距離は 10^{-3} cm , すなわち, $10\mu\text{m}$ 程度であるので, 空乏層の外では注入された少数キャリヤはほとんど再結合しない条件である. 図5に電流密度の深さ依存性を示す. J_n は電子電流密度, J_p は正孔電流密度, J は全電流密度, すなわち J_n と J_p の和である. 光照射がなく, 定常状態であるから, (3), (5) より次式が成立する.

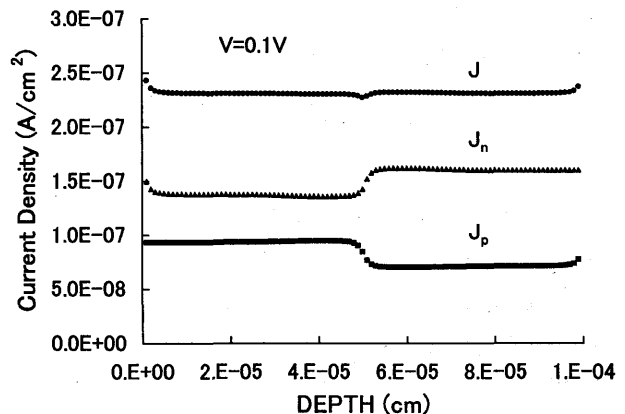


図5 電流密度の深さ方向分布
Fig. 5 Depth profiles of current densities

$$\frac{\partial J_n}{\partial x} = qR \quad (4.3)$$

$$\frac{\partial J_p}{\partial x} = -qR \quad (4.4)$$

これらの式より、再結合がおきている場所では、 J_n は x の増加とともに増加し J_p は減少することがわかる。また、生成がおきている場所ではその逆である。さらに、生成も再結合もおきていない場所では J_n 、 J_p は一定である。図5より、接合の境界付近でのみ再結合がおき、それ以外では生成、再結合はおきていないことがわかる。また、全電流密度は一定になっており、物理的に正しい。ただし、境界（両電極）および接合の境界付近でやや増減しているが、これは数値計算上の問題である。メッシュを等間隔にしたため、これらの領域ではメッシュ間隔が大きすぎたためであると考えられる。図6は電子濃度、正孔濃度の深さ依存性である。以上のように、数値計算に

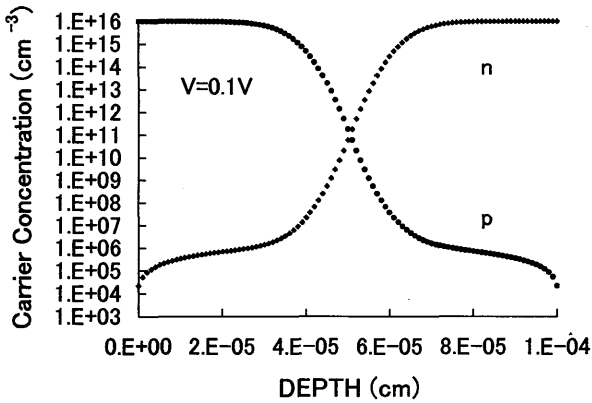


図6 キャリヤ濃度の深さ方向分布
Fig. 6 Depth profiles of carrier concentrations

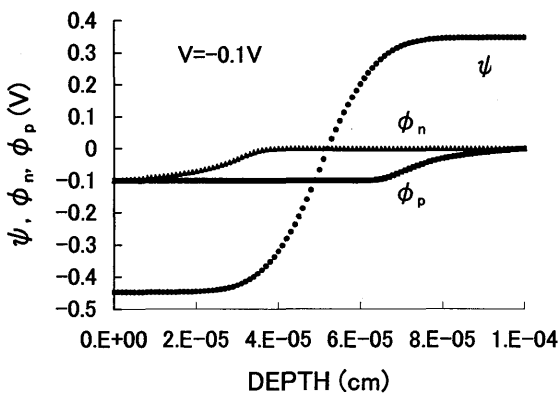


図7 電位と擬フェルミポテンシャルの深さ方向分布
Fig. 7 Depth profiles of potential and pseudo fermi potentials

より、物理的に正しい結果が得られた。次に逆バイアスのときの結果を示す。図7、図8は印加電圧が-0.1

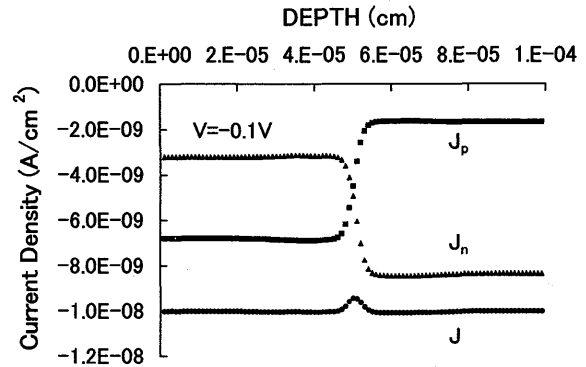


図8 電流密度の深さ方向分布
Fig. 8 Depth profiles of current densities

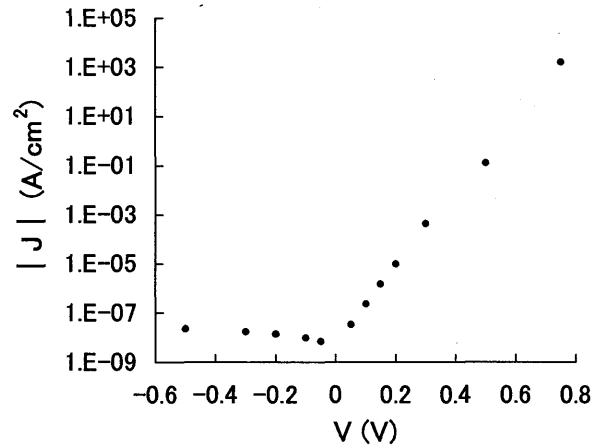


図9 電流密度の印加電圧依存性
Fig. 9 Applied voltage dependence of current density

V のときの結果である。図7が ψ 、 ϕ_n 、 ϕ_p 、図8が電流密度の結果である。逆バイアスのときは、図7に示すように ϕ_n 、 ϕ_p は順バイアスのときよりも中央よりから変化し始めることがわかる。また、電流密度の結果から、接合の境界付近でのみ生成がおきていることがわかる。全電流密度はほぼ一定であるが、接合の境界付近でやや変化が見られる。これは数値計算上の問題である。図9は全電流密度の印加電圧依存性の結果である。順方向は指数関数的に電流密度が増加し、逆方向は電流密度が小さく、印加電圧依存性は小さくなっており、pn接合の整流性を示している。

4.3 光照射を行った場合

p形層のみのSiに光照射を行った場合の結果をまず述べる。光照射による電荷生成率 G_e が $1 \times 10^{-3} \text{C cm}^{-3} \text{s}^{-1}$ で、印加電圧 $V=0$ のときの電位、擬フェルミポテンシャルの深さ依存性を図10に示す。不純物濃度は $1 \times 10^{16} \text{cm}^{-3}$ である。 ψ 、 ϕ_p は一定で、少数キャ

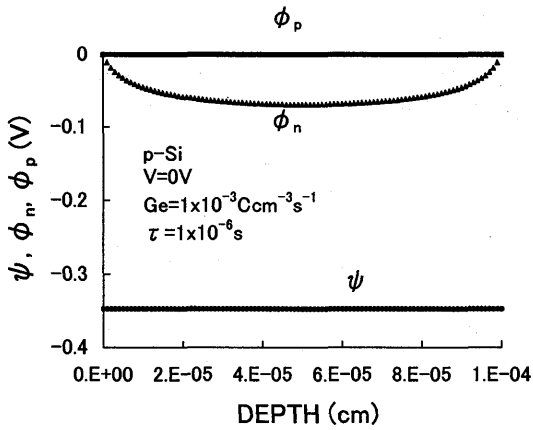


図 10 電位と擬フェルミポテンシャルの深さ方向分布
Fig. 10 Depth profiles of potential and pseudo fermi potentials

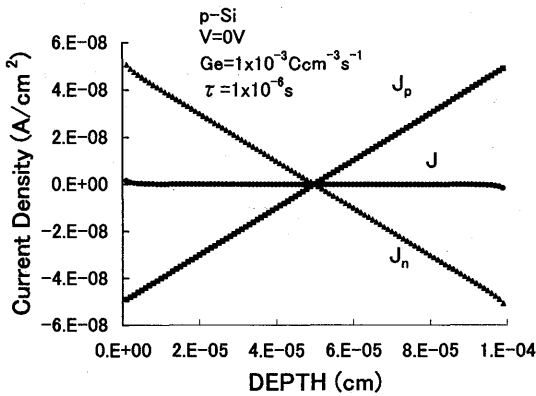


図 11 電流密度の深さ方向分布
Fig. 11 Depth profiles of current densities

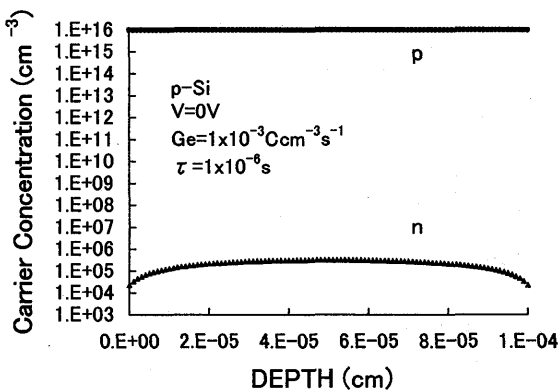


図 12 キャリヤ濃度の深さ方向分布
Fig. 12 Depth profiles of carrier concentrations

リヤの擬フェルミポテンシャル ϕ_n は中央で最小となっていることがわかる。図 11 は電流密度の深さ依存性で

ある。 J_n , J_p は直線的に変化しており、全電流密度は一定で 0 である。光照射がある場合は、(43), (44) のかわりに次式が成立する。

$$\frac{\partial J_n}{\partial x} = qR - Ge \quad (45)$$

$$\frac{\partial J_p}{\partial x} = -qR + Ge \quad (46)$$

図 11 では、再結合率 R が 0 とみなせる場合であり、直線の傾きが Ge となる。直線の傾きは $1 \times 10^{-3} \text{Ccm}^{-3} \text{s}^{-1}$ となっている。図 12 はキャリヤ濃度の深さ依存性を示すものであり、中央付近で電子濃度が平衡濃度より 1 桁以上大きくなっている。以上の結果はキャリヤのライフタイムが $1 \mu\text{s}$ であったが、ライフタイムが $1 \times 10^{-11} \text{s}$ と非常に小さいときの結果を図 13, 14 に示す。図 13 は電流密度の結果である。今度は J_n , J_p は直線的な変化をしない。これはライフタイムが小さいために再結合が大きくなるためである。そのため、図 14 のキャリヤ濃度の深さ依存性の結果に示すように、中央付近の電子濃度はライフタイムが大きい場合に比べて小さくなっている。

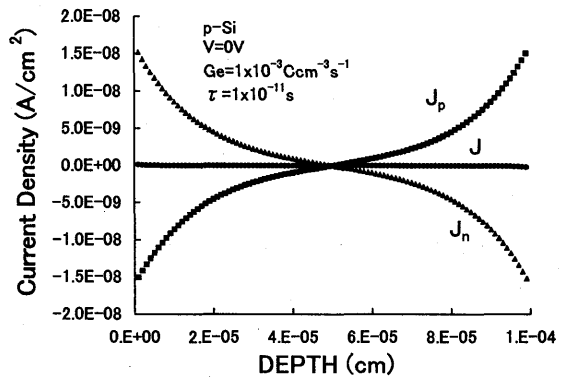


図 13 電流密度の深さ方向分布
Fig. 13 Depth profiles of current densities

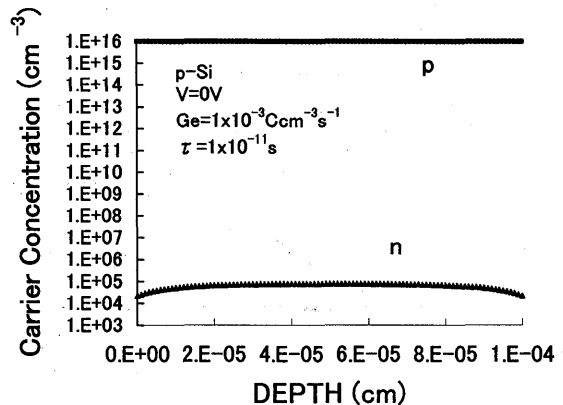


図 14 キャリヤ濃度の深さ方向分布
Fig. 14 Depth profiles of carrier concentrations

次に、pn接合に光照射を行ったときの結果を述べる。
図4～9に示す構造のpn接合に $G_e = 1 \times 10^{-3} \text{C}$

$\text{cm}^{-3} \text{s}^{-1}$ の光照射を行ったときの ϕ , ϕ_n , ϕ_p の深さ依存性を図15に示す。 $V = 0$ である。 p形領域の内部で ϕ_n が極小値を持ち、 n形領域の内部で ϕ_p が極大値を持っている。 図16は電流密度の結果である。 図11と同様に、 J_n , J_p とも直線的に変化している。 これは、再結合がおきていないことを示している。 全電流密度は0ではなく、 $-7 \times 10^{-8} \text{A/cm}^2$ になっている。 印加電圧が0でも電流が逆方向に流れており、光起電力による電流、すなわち太陽電池の機能を表している。 図17は順方向に電圧を0.1V印加したときの電流密度の結果である。 J_n , J_p の傾きが接合の境界付近で逆になっている。 これは、この領域で再結合がおきていることを示している。 全電流密度は正の値、すなわち順方向となっている。 $V = -0.05 \text{V}$ のときの擬フェルミポテンシャルを図18に、電流密度を図19に示す。 J_n , J_p の傾きが接合の境界付近で急峻になっている。 これは、この領域で、光による生成の他に、キャリアの生成が起きていることを示す。

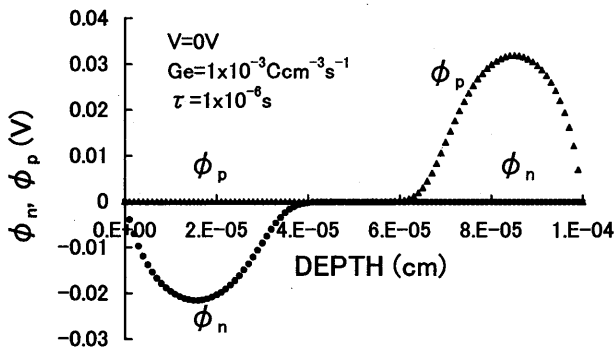


図15 擬フェルミポテンシャルの深さ方向分布
Fig. 15 Depth profiles of pseudo fermi potentials

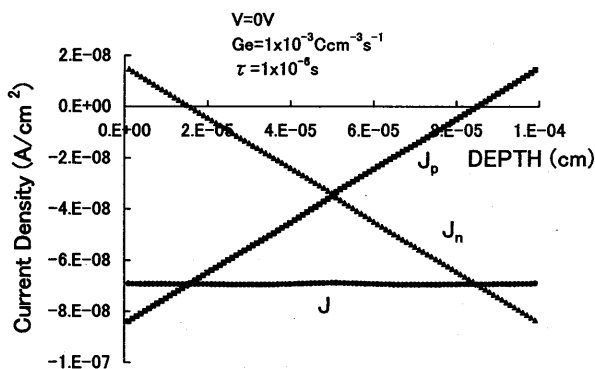


図16 電流密度の深さ方向分布
Fig. 16 Depth profiles of carrier concentrations

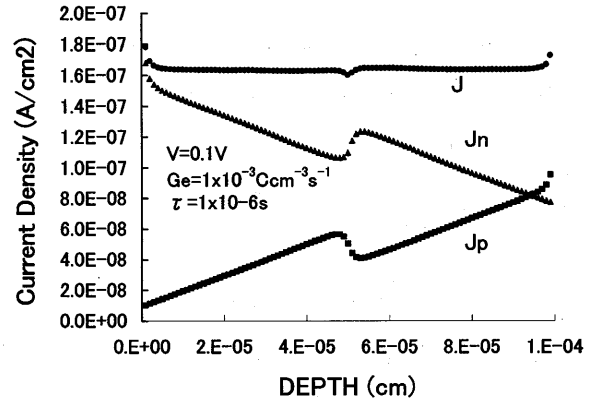


図17 電流密度の深さ方向分布
Fig. 17 Depth profiles of carrier concentrations

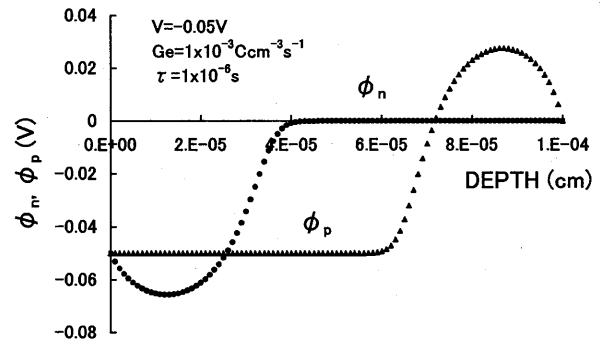


図18 擬フェルミポテンシャルの深さ方向分布
Fig. 18 Depth profiles of pseudo fermi potentials

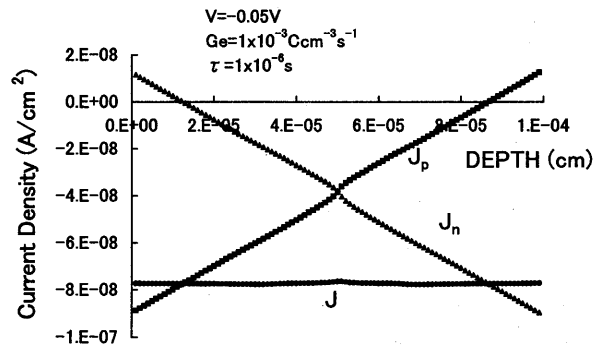


図19 電流密度の深さ方向分布
Fig. 19 Depth profiles of carrier concentrations

図20に、電流密度の印加電圧依存性を示す。これから、開放時の起電力は0.07Vであることがわかる。印加電圧が0Vのときの電流密度の光による電荷生成率依存性を図21に示す。キャリアライフタイムが $1 \times 10^{-6} \text{s}$ と $1 \times 10^{-12} \text{s}$ の2つについて示す。いずれも電流密

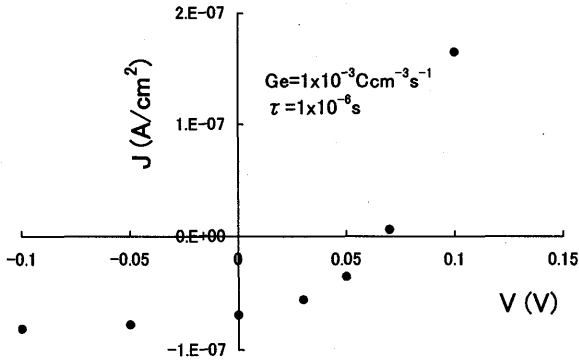


図20 照射したpn接合の電流-電圧特性
Fig. 20 Current-voltage characteristics of an illuminated pn junction

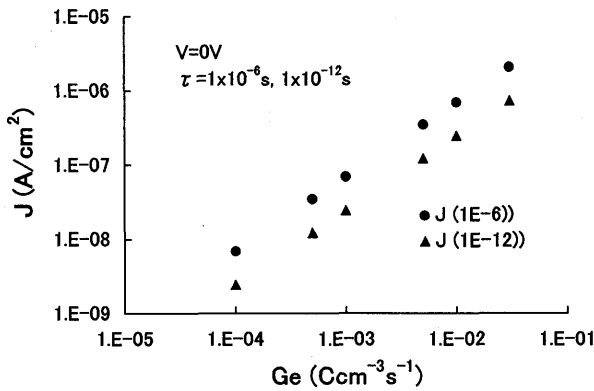


図21 電流密度の照射による電荷発生率依存性
Fig. 21 Dependence of current density on charge generation rate

度は電荷生成率に比例している。また、ライフタイムが $1 \times 10^{-6} \text{ s}$ の方が $1 \times 10^{-12} \text{ s}$ よりも電流値が大きいことがわかる。Geの値が $1 \times 10^{-2} \text{ C cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$ 程度と大きくなると、数値計算プログラムは収束しなかった。このような場合には、Geの値を $5 \times 10^{-3} \text{ C cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$ 程度づつステップ状に増加させて計算すると収束した。また、印加電圧が大きくなると収束しなかった。収束の領域を拓げるためには、メッシュ間隔の設定等プログラムをさらに改良する必要がある。以上述べたように、印加電圧があまり大きくないときは、物理的に正しい解が得られる数値計算プログラムを作った。これを用いることにより、照射を行ったpn接合の電気的特性を数値計算でき、半導体内部でどのような現象が起きているかを理解することができる。

5. まとめ

半導体デバイスの電気的特性評価に際しては、デバイスの電気特性への照射の効果を定量的に把握しておくことが必要である。本報告では、Siデバイスの内、pn接合への照射効果を数値計算により明らかにした。ポアソンの方程式、電流の式、電荷連続の式を定常状態の下で数値計算により解くプログラムを作成した。これを用いて、照射を行ったpn接合の、ポテンシャルの深さ依存性、電流密度の深さ依存性、キャリア濃度の深さ依存性を明らかにした。また、電流-電圧特性、電流値の光による電荷生成率依存性を明らかにした。さらに、これらの特性へのキャリアライフタイムの値の与える効果についても計算した。このように、簡単な数値計算プログラムにより、半導体内部でどのような現象が起きているかを理解することができる。

参考文献

- [1] B. V. Gokhale, "Numerical Solution for a One-Dimensional Silicon n-p-n Transistor," IEEE Trans. Electron Devices, ED-17 594(1970)
- [2] R. W. Klopfenstein and C. P. Wu, "Computer Solution of One-Dimensional Poisson's Equation," IEEE Trans. Electron Devices, ED-22 329(1975)