数値計算による半導体物性解析手法について2
-静電ポテンシャルと波動関数分布の関係-

清水　共*, 森　優策†, 長岡　史郎*

Analysis of Semiconductor Physics by use of Numerical Simulation 2
- Relation with Electrostatic Potential and Wave Function distributions -

Tomo SHIMIZU*, Yusaku MORI†, Shiro NAGAOKA*

Abstract

The life of people is supported by a lot of electronic equipment now. The equipment consists of nanoscale devices. This paper presents a method of numerical simulations to analyze electronic properties of the devices. The infinite square well potential is used as a simplified device model of a Double Gate FET. Schrödinger equation and Poisson equation in x-direction perpendicular to the well potential are analyzed. The relationships between wave functions and electrostatic potential energies are reported.

Keywords: Poisson equation, Schrödinger equation, well potential, wave function

1　はじめに

現代社会を生きる人類は，世界中どこにいても程度の差こそあれ電子機器と無縁な生活は考えられない[1)]。この電子機器を支えているのは，技術の粋を尽くした半導体デバイスであると言って過言では無い。半導体デバイスは微細化のトレンドに沿って近年までにデバイス寸法が極小化して nm サイズへ突入している[2)]。

そこで，我々は極微細な半導体デバイスの特性解析において，電子を取り扱うために量子力学的効果を導入することの重要性を鑑みて，量子力学の代表的問題である１次元井戸型ポテンシャル問題を数値計算により評価する方法を前回報告している[3)]。数値計算ライブラリである CLAPACK の導入により，比較的容易に大規模な計算が可能であることを紹介した[4)]。

本報告書では，前回割愛した Poisson 方程式の数値計算方法に加えて，Poisson 方程式によるシミュレーション結果と量子力学の基本方程式である Schrödinger 方程式のシミュレーションを連動することでより実践的な１次元の井戸型ポテンシャル問題を数値計算により評価する。

2　数値計算用のデバイスモデル

図１は，近年注目される電界効果型トランジスタである DG(Double Gate) FET の３次元構造を示している[5)]。DG FET は Double Gate 構造に注目すれば，source-drain 間の電流路であるチャネル

*香川高等専門学校詫間キャンパス 電子システム工学科
†宝田電産株式会社

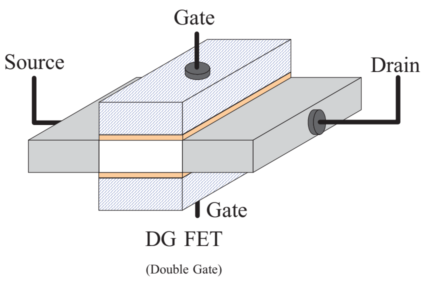

図 1: DG FET の 3 次元構造図

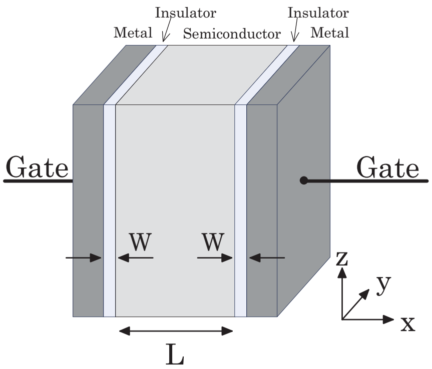

図 2: DG FET のゲート領域に対する簡易モデル（平行平板コンデンサ）の概念図

（半導体領域）が二つの Gate によって挟まれる。デバイス構造の微細化により ゲート方向に量子井戸が形成されチャネルを形成する電子の閉じ込めが起こる。

図 2 は，図 1 に示す DG FET に対して Double Gate 構造に挟まれた領域，すなわち，電子の通り道であるチャネル領域に注目してゲート領域を平行平板コンデンサとして簡易モデル化したデバイスモデルである。図に示すように，ゲート領域はゲート端子によって Metal-Insutator-Semiconductor (MIS) のサンドイッチ構造を持つコンデンサとなる。ここで，L はチャネル幅，W は絶縁体幅であり，図に示すようにチャネル幅方向（MIS 垂直方向）を x 軸方向，MIS 平行方向を y, z 軸方向にとる。

図 2 に示すデバイスモデルにおける電子状態を考える。ここで，微細デバイスを想定しているためチャネル幅 L を nm サイズとして電子を 1 次元方向に束縛（閉じ込め）する。他方で，MIS 界面に平行方向 (y-z 面方向) は電子の束縛が生じないほど十分に大きな領域であると仮定して 2 次元自由電子問題として扱う。この仮定の下に電子状態を解析するために Schrödinger 方程式を以下のように変数分離する。

このデバイスモデルに対して，i 番目の固有エネルギー（エネルギー準位）に対する波動関数 $\varphi_i(\vec{r})$ は，次式の Schrödinger 方程式を満足する。

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right\}+V(\vec{r})\right]\varphi_i(\vec{r}) = \varepsilon_i\varphi_i(\vec{r}) \quad (1)$$

ここで，位置ベクトル $\vec{r}=(x,y,z)$，$V(\vec{r})$ は静電ポテンシャル，$\hbar$ は Planck 定数，ε_i は固有エネルギー，m は電子の質量である。また，波数ベクトルは $\vec{k}=(k_x,k_y,k_z)$ である。

y-z 面方向は自由電子問題を仮定するために，一様なポテンシャル分布とする。よって，y-z 面方向の波動関数 $\zeta(y,z)$ は次式で与えられる。

$$\zeta(y,z)=e^{i(k_y y+k_z z)} \quad (2)$$

このとき，$\zeta(y,z)$ の固有エネルギー E_{yz} は次式となる。

$$E_{yz}=\frac{\hbar^2}{2m}(k_y^2+k_z^2) \quad (3)$$

y-z 面方向が一様な静電ポテンシャル分布であるため，式 (1) の $V(\vec{r})$ は x 方向のみに依存した関数となる。

$$V(\vec{r})=V_x(x) \quad (4)$$

また，x 方向の i 番目の固有エネルギー $E_{x,i}$ に対応する波動関数を $\phi_i(x)$ とすると，この系の波動関数 $\varphi_i(\vec{r})$ は次式となる。

$$\varphi_i(\vec{r})=\phi_i(x)\zeta(x,y)=\phi_i(x)e^{i(k_y y+k_z z)} \quad (5)$$

式 (4),(5) を式 (1) へ代入する。

$$\frac{1}{\phi_i(x)}\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V_x(x)\right\}\phi_i(x) +\frac{1}{\zeta(y,z)}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right\}\right]\zeta(y,z) =\varepsilon_i \quad (6)$$

式 (6) において，左辺の第一項と第二項の和が常に定数 ε_i である条件から，左辺の第一項と第二項がともに常に定数となる。よって，右辺の固有エネルギー ε_i を次式の様に x 方向成分 $E_{x,i}$ と y-z 面方向成分 E_{yz} の和とする。

$$\varepsilon_i=E_{x,i}+E_{yz} \quad (7)$$

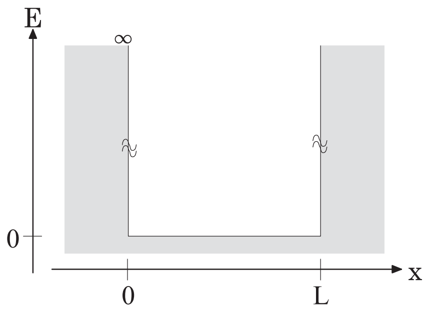

図 3: 無限エネルギー障壁の井戸型ポテンシャル（Plate 形井戸型ポテンシャル）

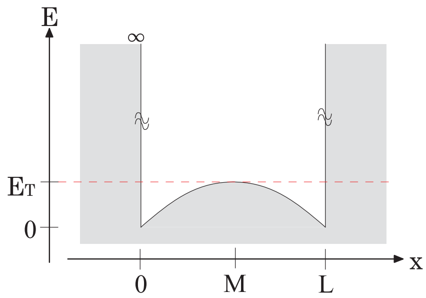

図 4: 無限エネルギー障壁の井戸型ポテンシャル（Hill 形井戸型ポテンシャル）

よって，式 (6),(7) より，独立した 2 つの Schrödinger 方程式が得られる。

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V_x(x)\right\}\phi_i(x)=E_{x,i}\phi_i(x) \quad (8)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\zeta(y,z)=E_{yz}\zeta(y,z) \quad (9)$$

式 (8) は 1 次元の Schrödinger 方程式の問題であり，式 (9) の Schrödinger 方程式は 2 次元自由電子問題である。

よって，このデバイスモデルを解析するために，我々は 1 次元 (x 方向) のみを y-z 面方向とは独立に計算すれば良いことが分かる。

次に，具体的に想定しているシミュレーション用のデバイスモデルを記述する。デバイス構造は前述しているように図 1 を使用する。絶縁膜 (Insulator) 層を high-k 材料であると仮定することで，チャネル層 (Semiconducor，ドナー原子を高濃度ドープした poly-Si を想定) を囲うポテンシャル障壁高さを無限大としてチャネルから絶縁層に向かい電子が染み込まないとする。これにより，ゲート領域である金属層 (Metal) をデバイス解析において考慮しない。

よって，このデバイスモデルにおいて想定されるポテンシャル分布は，図 3 に示す無限高のエネルギー障壁を持つ井戸型ポテンシャル問題となる。図に示すポテンシャル分布を Plate 形と名付ける。ここで，静電ポテンシャルエネルギーの基準として井戸の底のポテンシャルエネルギーを $E = 0$ としている。

この報告書では，次の手順で解析することにより，図 3 に示す単純な井戸型ポテンシャル問題から一歩踏み出した静電ポテンシャルと波動関数の分布の関係を報告する。具体的には，デバイスモデルからチャネル（Plate 形井戸型ポテンシャルの内部）領域に存在する一様な電子分布から静電ポテンシャル分布 $V(x)$ を Poisson 方程式のシミュレータによって計算する。その後，生成された新しい井戸内の静電ポテンシャル分布から Schrödinger 方程式のシミュレータにより電子（波動関数）分布を再構成する。このとき利用する新しい静電ポテンシャル分布のイメージが図 4 である。井戸内の一様な電子分布から，井戸端から絶縁膜へ向かう電子の染み出しが存在しないこのデバイスモデルでは，井戸両端の静電ポテンシャルエネルギーが基準値（ここでは零）となり，図のように井戸中央 ($x = M$) で最高値 E_T をとる左右対称な山形の静電ポテンシャル分布となる。ここで，図に示すポテンシャル分布を Hill 形と名付ける。

これにより，単純な無限高のエネルギー障壁を持つ井戸型ポテンシャル問題では生じない静電ポテンシャル分布の影響，すなわち，井戸内に空間的に電子の存在しやすい場所と存在しにくい場所，が生まれる。

3　Poisson 方程式の差分化

電磁気学の基本方程式に Maxwell 方程式があるが，その中で静電場における基本法則は次式の二つである。

$$\nabla\cdot\boldsymbol{D}=\rho,\quad \nabla\cdot\boldsymbol{E}=\frac{\rho}{\varepsilon} \quad (10)$$

$$\nabla\times\boldsymbol{E}=0 \quad (11)$$

ここで，$\boldsymbol{D}$ は電束密度，$\boldsymbol{E}$ は電場，ρ は電荷密度，ε は誘電率である。静電ポテンシャルでは式 (11) より，電場は電位の勾配によって次式で記述される。

$$\boldsymbol{E}=-\nabla V \quad (12)$$

ここで，V は静電ポテンシャルである。この二つの基本方程式から，静電ポテンシャルと電荷密度分布の関係が次式の Poisson 方程式として導かれる。

$$\Delta V = \nabla^2 V = -\frac{\rho}{\varepsilon} \tag{13}$$

ここでは，前回の研究紀要で割愛した Poisson 方程式の差分化について考える。研究対象が量子力学の基本問題である一次元井戸型ポテンシャル問題を想定しているため，この Poisson 方程式も以下のように x 軸方向に対する一次元の Poisson 方程式とする。

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}V(x) = -\frac{\rho(x)}{\varepsilon_a} \tag{14}$$

ここで，$V(x)$ は電位分布，$\rho(x)$ は空間電荷密度分布，ε_a は誘電率である。また，電荷は幅 $L[m]$ の空間にポテンシャル $V(x)$ によって閉じ込められている。

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 \le x \le L \\ \infty & 0 > x, L < x \end{cases} \tag{15}$$

井戸幅方向である x 軸の原点 $(x=0)$ を井戸端として，もう一方の端を $x = L$ とする。

上記の 1 次元 Poisson 方程式は 2 階の微分方程式である。よって，数値計算するために微分方程式を差分化する。計算に使用する x 方向の分割（メッシュ）間隔を Δx として離散化することで，井戸内を N 点に分割する。井戸端 $x = 0$ を x_0 として，もう一方の井戸端 $x = L$ を x_{N+1} とする。$V(x)$ と $\rho(x)$ は，$V(x_j)$ と $\rho(x_j)$ として離散値データとして扱われる。ここで，$j = 0, 1, 2, ..., N, N+1$ である。二回微分の静電ポテンシャルは，下記のように差分化される。

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}V(x) &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left\{\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}V(x)\right\} \\
&= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left\{\frac{V(x_{j+1}) - V(x_j)}{\Delta x}\right\} \\
&= \frac{\frac{V(x_{j+1})-V(x_j)}{\Delta x} - \frac{V(x_j)-V(x_{j-1})}{\Delta x}}{\Delta x} \\
&= \frac{1}{(\Delta x)^2}\{V(x_{j+1}) \\
&\qquad + V(x_{j-1}) - 2V(x_j)\}
\end{aligned} \tag{16}$$

式 (14) を式 (16) によって差分方程式に変換することで，位置 $x = x_j$ における Poisson 方程式は次式として表される。

$$\begin{aligned}
&V(x_{j+1}) + V(x_{j-1}) - 2V(x_j) \\
&\qquad = -\frac{\rho(x_j)}{\varepsilon_a}(\Delta x)^2
\end{aligned} \tag{17}$$

式 (15) の境界条件により，静電ポテンシャルは井戸端で零 (基準値) としている。すなわち，$V(x)$ は井戸端で次式の境界条件を満足する。

$$V(x_0) = V(x_{N+1}) = 0 \tag{18}$$

式 (17) と式 (18) の関係から，井戸内の $j = 1, 2, ..., N$ の各 x_j 点で Poisson 方程式を立てると次のような N 個の方程式ができる。

$$\begin{aligned}
V(x_2) - 2V(x_1) &= -\frac{(\Delta x)^2}{\varepsilon_a}\rho(x_1) \\
V(x_3) - 2V(x_2) + V(x_1) &= -\frac{(\Delta x)^2}{\varepsilon_a}\rho(x_2) \\
V(x_4) - 2V(x_3) + V(x_2) &= -\frac{(\Delta x)^2}{\varepsilon_a}\rho(x_3) \\
&\vdots \\
V(x_{N-1}) - 2V(x_{N-2}) & \\
+V(x_{N-3}) &= -\frac{(\Delta x)^2}{\varepsilon_a}\rho(x_{N-2}) \\
V(x_N) - 2V(x_{N-1}) & \\
+V(x_{N-2}) &= -\frac{(\Delta x)^2}{\varepsilon_a}\rho(x_{N-1}) \\
-2V(x_N) + V(x_{N-1}) &= -\frac{(\Delta x)^2}{\varepsilon_a}\rho(x_N)
\end{aligned} \tag{19}$$

式 (19) を行列形式で記述すると次式となる。

$$\begin{bmatrix}
-2 & 1 & 0 & \cdots & & & 0 \\
1 & -2 & 1 & 0 & \cdots & & 0 \\
0 & 1 & -2 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\
\vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\
0 & \cdots & 0 & 1 & -2 & 1 & 0 \\
0 & & \cdots & 0 & 1 & -2 & 1 \\
0 & & & \cdots & 0 & 1 & 2
\end{bmatrix}
\times \begin{bmatrix} V(x_1) \\ V(x_2) \\ V(x_3) \\ \vdots \\ V(x_{N-2}) \\ V(x_{N-1}) \\ V(x_N) \end{bmatrix}
= -\frac{(\Delta x)^2}{\varepsilon_a}\begin{bmatrix} \rho(x_1) \\ \rho(x_2) \\ \rho(x_3) \\ \vdots \\ \rho(x_{N-2}) \\ \rho(x_{N-1}) \\ \rho(x_N) \end{bmatrix} \tag{20}$$

式 (20) を次式の様に表記すれば，係数行列 $\mathbf{A}$ の N 元連立一次方程式問題である。

$$\mathbf{A}\vec{V} = \vec{\rho} \tag{21}$$

ここで，行列 $\mathbf{A}$ が式 (20) から分かるように三重対角行列となる。よって，前回の研究紀要で紹介したオー

プンソースソフトウェアである線形代数演算ライブラリ LAPACK(Linear Algebra PACKage) の dgesv 関数を利用することで，手軽に数値計算できる。

4　デバイスモデルの解析

図 2 のデバイスモデルにおいて，チャネル幅を $L = 10[nm]$ として十分に量子効果が期待できるサイズとする。また，チャネル領域を形成する poly-Si に与えるドナー濃度を $N_D = 1.2 \times 10^{20}[cm^{-3}]$ とする。ここで，全てのドナーが完全にイオン化している $(N_D^+ = N_D)$ と仮定すると，チャネル領域である井戸内の電子の電荷密度 $\rho(x)$ は次式の関係となる。

$$\rho(x) = N_D^+ = 1.2 \times 10^{20}[cm^{-3}] \tag{22}$$

第 3 節の数値計算法により作成した Poisson 方程式のシミュレータを使い，式 (22) の一様な電荷密度分布から静電ポテンシャル分布を計算する。ここで，真空の誘電率 $\varepsilon_0 = 8.85 \times 10^{-12} \left[\frac{F}{m}\right]$，poly-Si の比誘電率 $\varepsilon_{Si} = 11.8$ を計算に使用する。また，計算に使用したメッシュ間隔は $\Delta x = 2.0 \times 10^{-2}[nm]$ である。

図 5 が，Poisson 方程式のシミュレータによる数値計算から得た静電ポテンシャル分布である。高濃度の電子分布により，最高値 $E_T \simeq 229.82[meV]$ のポテンシャル障壁が井戸中央 $M(x = 5[nm])$ で発生する。

次に，Schrödinger 方程式のシミュレータを利用した静電ポテンシャル分布から固有エネルギーと波動関数分布を求める数値計算を考える。まず，比較用に，前述のデバイスモデルにおいて井戸内のポテンシャルが一様である条件，すなわち，図 3 に示す Plate 形井戸型ポテンシャル分布に対して数値計算する。ここで，電子質量 $m = 9.11 \times 10^{-31}[kg]$，プランク定数 $\hbar = 6.58 \times 10^{-16}[eVs]$ を計算に使用する。

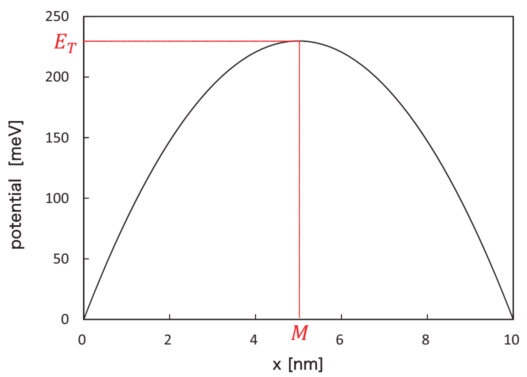

図 5: 井戸内の一様電荷分布によるポテンシャル分布

表 1: Plate 形静電ポテンシャルに対する固有エネルギーの数値計算結果

量子数 n	状態	固有エネルギー $E_n[meV]$
1	基底	3.76
2	第 1 励起	15.05
3	第 2 励起	33.85
4	第 3 励起	60.18

表 1 は，数値計算により得た波動関数の固有エネルギー値である。無限障壁高の井戸型ポテンシャルに対して，解析的に Schrödinger 方程式を解けば次式として固有エネルギーが得られる。

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2 \qquad (n = 1, 2, ...) \tag{23}$$

ここで，n は量子数である。表に示す計算された固有エネルギー値は式 (23) の解析値と良く一致している。前回の報告書において検討したようにメッシュ間隔が小さくなり計算精度が向上したと考えられる。

図 6 は，表 1 の結果と伴に数値計算から得られた波動関数 $\phi_n(x)$ に対して，下式により波動関数が規格化された $n = 1, 2, 3, 4$ に対応する基底状態と励起状態の存在確率密度分布 $|\phi_n(x)|^2$ である。

$$\begin{aligned} \int_0^L |\phi_n(x)|^2 \, \mathrm{d}x &= \sum_{j=1}^{N} |\phi_n(x_j)|^2 \Delta x \\ &= 1 \end{aligned} \tag{24}$$

式 (24) は，井戸内が無限高のポテンシャル障壁に囲まれているため各状態の電子が井戸内にのみ存在することを意味している。この波動関数も固有エネルギーと同様に，井戸型ポテンシャル問題として解

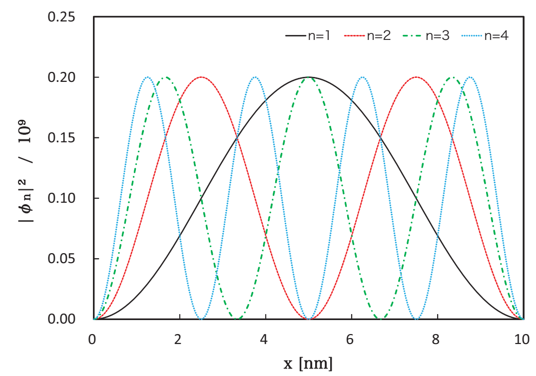

図 6: Plate 形井戸型ポテンシャルにおける波動関数分布

表 2: Hill 形静電ポテンシャルに対する固有エネルギーの計算結果

固有エネルギー	$[meV]$
E_{0a}, E_{0b}	69.51
E_{1a}, E_{1b}	118.10
E_2, E_3	154.32
E_4, E_5	183.17
E_6	206.32
E_7	206.34
E_6	223.52
E_9	224.49
E_{10}	234.00

析値が良く知られている。計算結果は解析値と良い一致を示している。

次に，図 4 に示すようにデバイスモデルの井戸内ポテンシャル分布に Poisson 方程式シミュレータによって計算された図 5 の静電ポテンシャル分布を適用して Hill 形井戸型ポテンシャル分布を形成する。この Hill 形静電ポテンシャル分布から Schrödinger 方程式のシミュレータを使用して固有エネルギーと波動関数分布を数値計算する。

表 2 は，この条件で計算された固有エネルギー値 E_n である。ここで，n はエネルギー準位の順番（低エネルギー値順）を表している。E_{ia}, E_{ib} の添字 a, b は，等しい固有エネルギー値を持つ空間的に独立な波動関数分布に対応した固有エネルギーであることを表している。i は，上述の n と同様にエネルギー準位の順番である。

図 7 は，シミュレーション用のデバイスモデルである図 5 の Hill 形井戸型静電ポテンシャル分布に，表 2 の固有エネルギー値を重ねて描画した相互関係図である。図から，井戸中央部に聳える有限高さのポテンシャル障壁により，低エネルギー領域において電子が存在可能な（存在しやすい）領域が井戸の左右に分断されていることが分かる。これに伴い，井戸内において電子が存在可能である実効的な井戸幅（束縛領域）が減少する。この結果，表 1 の Plate 形と比較して表 2 の Hill 形ポテンシャルのデバイスモデルに対する固有エネルギー値が増加する。最も低い固有エネルギーから順に 4 番目まで，それぞれの固有エネルギーには 2 重の縮退が数値計算上の誤差を無視すれば見られる。この固有状態の縮退の機構は，固有エネルギーに対応する波動関数分布から 2 つに分けられる。

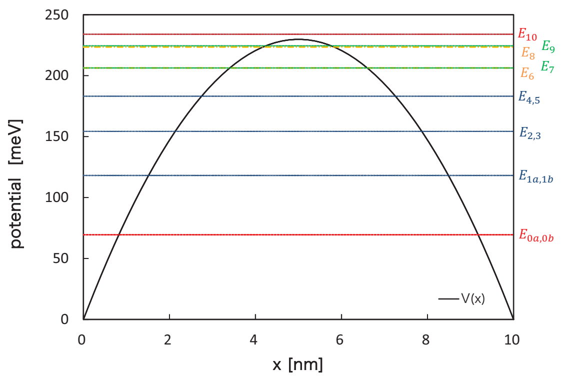

図 7: Hill 形井戸型ポテンシャルと固有エネルギーの関係

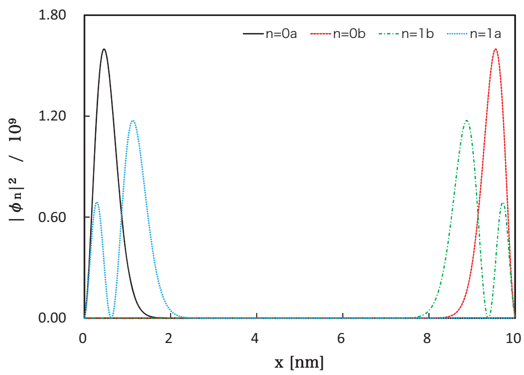

図 8: Hill 形井戸型ポテンシャルにおける波動関数分布 (n=0a,0b,1a,1b)

まず，固有エネルギー値が Hill 形ポテンシャル障壁と比較して十分に低い場合，E_{ia}, E_{ib} $(i = 0, 1)$ の波動関数分布を考える。図 8 は，この固有エネルギー $E_{ia}, E_{ib} (i = 0, 1)$ に対応した波動関数の存在確率密度分布である。図から，波動関数は左右の井戸端近傍に空間的に偏って分布する。$i = 0, 1$ に関する限り，添字 a, b に対応する 2 つの波動関数はそれぞれ独立して存在し，且つ井戸中央の位置に対して左右対称な分布形状をとる。これは，井戸中央の Hill 形ポテンシャル障壁により，空間的に完全に独立した固有状態を意味する。この結果として，$i = 0, 1$ の固有エネルギー状態はそれぞれ 2 重に縮退する。

次に，固有エネルギー値が Hill 形ポテンシャル障壁より少し低い場合，E_n $(1 < n < 10)$ の波動関数分布を考える。図 9 は，固有エネルギー E_2, E_3 に対応した波動関数の存在確率密度分布である。図から明らかなように，図 8 の分布とは異なり各固有状態の波動関数は井戸全体に渡って存在する。この存在確率密度分布から縮退している 2 つの波動関数に大きな差違は見られないが，波動関数の位相差が π である結果を別途に得ている。すなわち，十分大き

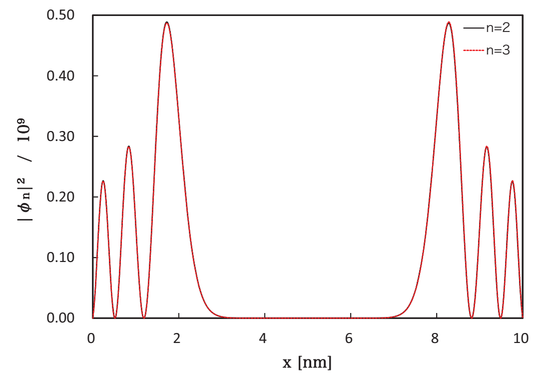

図 9: Hill 形井戸型ポテンシャルにおける波動関数分布 (n=2,3)

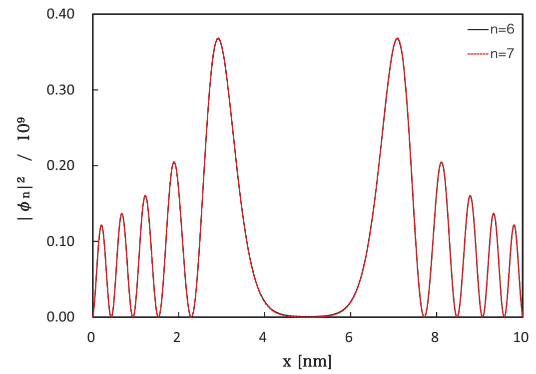

図 10: Hill 形井戸型ポテンシャルにおける波動関数分布 (n=6,7)

な固有エネルギーを持つ固有状態は，有限高さを持つ Hill 形ポテンシャル障壁を電子がトンネリングして井戸全体で一つの固有状態を発生することを意味する。

図 10 は，固有エネルギー E_6, E_7 に対応した波動関数の存在確率密度分布である。固有エネルギー E_2, E_3 の波動関数と同様に，グラフからはこの二つの波動関数分布には差違が見られない。これは，固有エネルギー $E_2 \simeq E_3$ の関係から分かるように，Hill 形ポテンシャル障壁によって空間的に分断された対称性の高い 2 つの束縛領域から派生した固有状態に起因した縮退状態と同様の状態であると考えられる。固有エネルギー E_4, E_5 の波動関数の分布は同様な傾向を示すため，ここでは割愛する。

図 11 は，固有エネルギー E_n $(n = 8, 9, 10)$ に対応した波動関数の存在確率密度分布である。固有エネルギーが大きく，Hill 形ポテンシャル障壁の影響をほとんど受けないため井戸中央部での存在確率密度が大きくなり，固有エネルギー値が縮退しない。

今回の報告書におけるシミュレーション結果は，物理的意味を持たない電子状態を与えている。これは，今回の計算において前提条件としている電子分

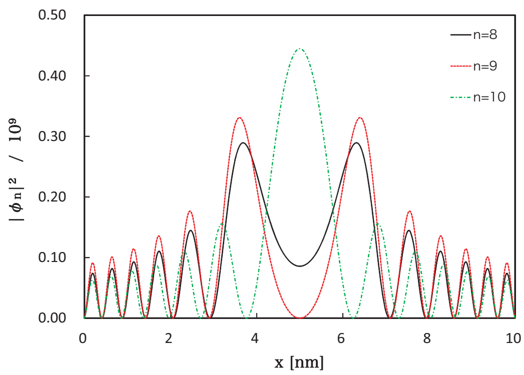

図 11: Hill 形井戸型ポテンシャルにおける波動関数分布 (n=8,9,10)

布が変われば電子分布自身に起因する静電ポテンシャル分布が変わるためであり，物理的意味があるシミュレーション結果を得るためには電子分布と静電ポテンシャル分布が自己無撞着 (self-consistent) に計算される必要がある [6]。

5　おわりに

半導体デバイスの微細化により，教育現場においても量子効果を取り入れたデバイス特性解析の必要性が増している現状を踏まえて，前回詳細を省いた井戸型ポテンシャル問題における Poisson 方程式の数値シミュレーションの方法を詳細に報告した。近年注目される半導体デバイスの一つである DG FET を解析するために，一次元井戸型ポテンシャル構造を持つ簡易デバイスモデルを提案した。数値計算シミュレーションの結果から，一般的な Plate 形無限高のエネルギー障壁の井戸型ポテンシャル問題に加えて，Hill 形無限高のエネルギー障壁の井戸型ポテンシャル問題を扱うことで，静電ポテンシャル分布と波動関数分布の関係を報告した。

参考文献

1) ”IC ガイドブック未来を創る半導体”, 社団法人電子情報技術産業協会, 2012

2) International Technology Roadmap for Semiconductors (ITRS), 2013 Edition (http://www.itrs2.net/)

3) 清水共，森優策，内海太禄，”数値計算による半導体物性解析手法－量子力学の基礎－”，香川高等専門学校研究紀要，第 6 号，pp.97-101 (2015)

4) Netlib Repository at UTK and ORNL (http://www.netlib.org/)

5) 平本俊郎 編著, ”集積ナノデバイス”, 丸善株式会社, 2009

6) K.Natori, M.Oniki, T.Kurusu and T.Shimizu, ”Capacitance Due to the Charge Layer Thickness in Nanoscale Capacitors”, Extended Abstracts 2005 Intern. Conf. Solid State Device and Materials (SSDM 2005), pp.286-287 (2005)