半導体デバイスモデルに由来する DRIFT-DIFFUSION 方程式系の解の減衰評価について

山本征法 (東北大学大学院理学研究科 M ２)

ここでは、半導体デバイスの解析に由来する Drift-Diffusion 型と呼ばれる方程式系の解析について講演する。応用上の観点から、特に空間次元 $n = 2, 3$ の場合を扱う。３次元のモデルについてはあらゆる半導体素子への応用が期待されるが、２次元のモデルについても、TFT 等の薄型素子の解析に対応している。

Mock[4] により提唱されたモデルは有界領域における Neumann 境界値問題として与えられたものであるが、今回は全空間におけるモデルについて扱う。

$$
(D.D.)\quad \begin{cases} \partial_t u - \Delta u + \nabla(u\nabla\psi) = f, & t>0,\ x\in\mathbb{R}^n,\\ \partial_t v - \Delta v - \nabla(v\nabla\psi) = f, & t>0,\ x\in\mathbb{R}^n,\\ -\Delta\psi = v - u - g, & t>0,\ x\in\mathbb{R}^n,\\ u(0,x)=u_0(x)\geq 0, v(0,x)=v_0(x)\geq 0, & x\in\mathbb{R}^n. \end{cases}
$$

ここで、$\partial_t u := \dfrac{\partial u}{\partial t},\quad \Delta u := \displaystyle\sum_{j=1}^{n} \frac{\partial^2 u}{\partial x_j^2}$,

$u = u(t,x), v = v(t,x)$ は、それぞれ、半導体デバイス内での電子、正孔の密度分布を表す未知函数であり、$\psi = \psi(t,x)$ は、u, v の分布によって形成される静電場のポテンシャルに対応している。又、非線形項 $f = f(u,v)$ は、電子と正孔の対消滅、対生成を表す函数であり、$g = g(x)$ は半導体に添加された二種類の不純物 (Accepter,Donor) の配合比率に関係する、与えられた時間定常函数である。

(D.D.) の解の適切性については、$f = f(t,x)$ を (u, v に依らない) 既知函数とした場合に、後述の mild solution に対する考察によって、(D.D.S.) の時間局所解の存在が示されている。更に、$f \equiv 0$, 及び g に適当な条件を課せば、エネルギー評価を行うことにより、$L^2(\mathbb{R}^n)$ における時間大域適切性を示すことが出来る [3]。

Proposition.[3] $n = 2, 3$ としたとき、

$$
\begin{aligned} &u_0, v_0 \in L^2(\mathbb{R}^n), u_0, v_0 \geq 0,\ f\equiv 0,\ g\in H^1(\mathbb{R}^n)\cap L^\infty(\mathbb{R}^n)\\ &\quad\Longrightarrow\ \exists 1 u, v \in C\big([0,\infty); L^2(\mathbb{R}^n)\big)\cap C\big((0,\infty); H^2(\mathbb{R}^n)\big)\cap C^1\big((0,\infty); L^2(\mathbb{R}^n)\big). \end{aligned}
$$

以下では、$f \equiv 0,\ g = 0$ として解析を行う。扱う方程式 (D.D.) は、半導体内部において、電子と正孔が互いに作用しながら不純物上を分散していく様子を記述したものである。方程式の形からも明らかなように、この分散には、熱力学的な力と、電気的な力の二通りの力が関わっている。こうした物理的な背景から、(D.D.) の解の漸近挙動は消散的であることが予想される。実際、次の結果を得ることが出来る。更に、この定理を証明する過程で、半導体デバイス内での電子と正孔の分散における、熱力学的な力と電気的な力とのバランスを考えたとき、熱力学的な力の方が強く働くことも分かった。言い換えれば、半導体内における電子と正孔の分散の仕方は、媒質中の熱の分散の仕方に極めて近いということである。

Theorem.[L^p- 減衰評価]
$n=2,3;\ 1\le p\le\infty,\ f=0,\ g=0$ とする。このとき (D.D.) の解 u,v に対して、

$$\|u(t)\|_p \le C_1(n,p)\|u_0\|_1\, t^{-\frac{n}{2}\left(1-\frac{1}{p}\right)} + C_2(n,p)\|u_0+v_0\|_1^2\, t^{-\frac{n}{2}\left(2-\frac{1}{p}\right)+1}, t>0,$$
$$\|v(t)\|_p \le C_1(n,p)\|v_0\|_1\, t^{-\frac{n}{2}\left(1-\frac{1}{p}\right)} + C_2(n,p)\|u_0+v_0\|_1^2\, t^{-\frac{n}{2}\left(2-\frac{1}{p}\right)+1}, t>0.$$

この形の減衰評価の既存の結果としては、岡本 [7] によって、$1\le p\le 4$ の場合の評価が得られている。証明には、Nash の方法 [5] が用いられているが、この方法では、$p>4$ の場合の計算過程が煩雑となり、$p\le 4$ の場合と同様の評価は得られなかった。ここでは、岡本の結果を用いて Nash の方法とは異なるアプローチにより、先述の結果を得た。具体的には、mild solution に対して、[7] で得られた $1\le p\le 4$ の場合の結果、以下に示す補題、及び、熱核に対する L^p 評価を用いることにより得られる。

Definition.[Mild solution][3]
$u,v\in C\big([0,T);L^2(\mathbb{R}^n)\big)$ が (D.D.S.) の mild solution であるとは、u,v が次を満たすことである。

$$\begin{cases} u(t,x)=e^{t\Delta}u_0(x)-\displaystyle\int_0^t e^{(t-\tau)\Delta}\left\{\nabla(u\nabla\psi)(\tau,x)-f(u,v)\right\}d\tau, & t>0,\ x\in\mathbb{R}^n,\\ v(t,x)=e^{t\Delta}v_0(x)+\displaystyle\int_0^t e^{(t-\tau)\Delta}\left\{\nabla(v\nabla\psi)(\tau,x)+f(u,v)\right\}d\tau, & t>0,\ x\in\mathbb{R}^n,\\ -\Delta\psi(t,x)=v(t,x)-u(t,x)-g(x), & t>0,\ x\in\mathbb{R}^n. \end{cases}$$

但し、$\varphi\in L^2(\mathbb{R}^n)$ に対して、$\left(e^{t\Delta}\varphi\right)(x):=\dfrac{1}{(4\pi t)^{\frac{n}{2}}}\displaystyle\int_{\mathbb{R}^n}\varphi(y)\exp\left(-\frac{|x-y|^2}{4t}\right)dy.$

Lemma.[Hardy-Littlewood-Sobolev の不等式]
$1<r<\infty,$

$$\|\nabla(-\Delta)^{-1}f\|_r\le C(n,r)\|f\|_\rho,\ \tfrac{1}{r}=\tfrac{1}{\rho}-\tfrac{1}{n},\ \forall f\in L^r(\mathbb{R}^n).$$

References

[1] Cazenave, T., Haraux, A., "An introduction to semilinear evolution equations", Oxford science publications, 1998.
[2] 儀我美一, 儀我美保, " 非線形偏微分方程式 ", 共立出版, 1999.
[3] Kurokiba, M., Ogawa, T., *Wellposedness for the Drift-diffusion system in L^p arising from the semiconductor device simulation*, preprint.
[4] Mock, M.,S., *Asymptotic behavior of solutions of transport equations for semiconductor devices,* J. Math. Anal. Appl. 49 (1975), 215-225.
[5] Nash, J., *Continuity of solutions of parabolic and elliptic equations,* Amer. J. Math. **80** (1958), 931-954.
[6] 小川卓克, "非線形分散及び波動方程式に対する実解析的手法と適切性 ", Rokko lectures in mathematics(神戸大学), 2006.
[7] 岡本龍太郎, Drift-diffusion 型偏微分方程式系の解に対する L^p-L^q 型時間減衰評価について, 九州大学修士論文, 2004 年.
[8] 米津宏雄, "改訂新版　半導体基礎用語辞典 ", 工学図書, 2006.

宮城県仙台市青葉区荒巻字青葉６番３号
E-mail address: sa5m27@math.tohoku.ac.jp