The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

Title	A Study of Numerical Methods for Transient Quantum Drift-Diffusion Equations Arising in Semiconductors
Author(s)	島田, 知子
Citation	大阪大学, 2009, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/49685
rights	
Note	著者からインターネット公開の許諾が得られていないため、論文の要旨のみを公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、大阪大学の博士論文についてをご参照ください。

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

https://ir.library.osaka-u.ac.jp/

The University of Osaka

【1】

氏　　名	島　田　知　子（しま だ とも こ）
博士の専攻分野の名称	博　士（情報科学）
学　位　記　番　号	第　２３０４４　号
学位授与年月日	平成21年３月24日
学位授与の要件	学位規則第４条第１項該当 情報科学研究科情報基礎数学専攻
学　位　論　文　名	A Study of Numerical Methods for Transient Quantum Drift-Diffusion Equations Arising in Semiconductors （半導体における非定常な量子ドリフト－拡散方程式の数値計算法に関する研究）
論　文　審　査　委　員	（主査） 教　授　小田中紳二 （副査） 教　授　松村　昭孝　　教　授　伊達　悦朗　　准教授　降旗　大介

論　文　内　容　の　要　旨

本論文では，半導体における非定常な量子ドリフト－拡散（QDD）方程式の数値計算法と時間離散化に対する数値安定性について述べ，系の自由エネルギーを導入することによって適応型時間ステップアルゴリズムを提案している．

半導体素子の微細化に伴い，室温下においても電子輸送の量子性をどのようにモデル化するかが新たな課題であり，Wigner-Boltzmann方程式より量子流体方程式を導出して電子輸送モデルが構築されている．その中で，QDDモデルは古典的ドリフト－拡散（DD）モデルに代わる先進的デバイスモデルとして，定常問題に対する数値計算法の研究が進んでいる．これに対して，非定常問題に関する研究は未だ十分ではない．非定常なDDモデルにおいては，自由エネルギーの散逸性が Gajewski-Gröger（1986）によってゼロバイアス条件下で示されており，これを基に時間離散化に対する数値安定性が議論されている．さらに，時間離散化に対して自由エネルギーを用いた時間ステップ制御が構築できることが示唆されているが，そのアルゴリズムの構成は示されていない．QDDモデルでは，自由エネルギーの散逸性は Gallego-Méhats（2005）によって，電圧がゼロで流れの無い境界条件下で示されており，時間離散化と反復解法がJüngel-Pinnau（2001）によって議論されている．

本論文では，第1章において，Wigner-Boltzmann方程式のChapman-Enskog展開によって量子流体方程式を導出している．それを基に，第2章において非定常なQDDモデルを導出し，その系に対する自由エネルギーの微分が古典的DDモデルと同一の形式で導入できることを示している．第3章では，Odanaka（2004）による空間離散化を用いて時間離散化と反復解法を提示し，ゼロバイアス条件下での時間離散化の数値安定性を与えている．第4章においては，第2章で導入された自由エネルギーを用いて適応型時間ステップアルゴリズムを提案し，1次元のn^+-n-n^+素子のスイッチング特性においてアルゴリズムを検証し，電子輸送の時間発展を少ない時間ステップ数で精度よく計算できることを示している．

論　文　審　査　の　結　果　の　要　旨

極微半導体構造においては、室温下においても電子輸送の量子性をどのようにモデル化するかが新たな課題である。近年、Wigner-Boltzmann方程式のChapman-Enskog展開により量子流体方程式を導出して電子輸送モデルを構築することが提案されており、このモデルに対して、数学的側面や物理学的側面から新たな計算理論を構築して計算モデルを構成することが必要となっている。その中で、量子流体モデルの階層の一つである量子ドリフト-拡散モデルにおいては、定常問題に対する数値計算法の研究が進展しているが、非定常問題に関する研究は未だ不十分である。今までの研究では、非定常な量子ドリフト-拡散モデルに関しては、電圧をゼロとし流れの無い境界条件下で系の自由エネルギーの散逸性が示されており、時間離散化の数値安定性と反復解法が議論されている。

本論文では、半導体における非定常な量子ドリフト-拡散方程式の数値計算法を構成している。古典的ドリフト-拡散モデルの解との相対自由エネルギーをとることによって、より一般的なゼロバイアス条件下での時間離散化の数値安定性が与えられており、Odanakaによる空間離散化手法を用いて反復解法が提示されている。さらに、系の自由エネルギーの微分が古典的ドリフト-拡散モデルと同一形式となることを示し、これを用いた時間離散化に対する適応型時間ステップ制御を提案して、そのアルゴリズムを構成した。この時間ステップアルゴリズムは半導体素子のスイッチング特性シミュレーションにも適用可能であり、スイッチング特性においてアルゴリズムを検証し、少ない時間ステップ数で、電子の時間発展が精度よく計算できることが示された。以上のように、本論文の成果は独創的であり、理論的にも実用的にも価値のあるものといえる。

よって、博士（情報科学）の学位論文として価値のあるものと認める。