

CIP 法による TOF 過渡電流波形のシミュレーション

Simulation of TOF Transient Currents by the CIP Method

三島 吉尊* 増田 貴宏* 鈴木 和彦* 瀬戸 悟**

Yoshitaka Mishima*, Takahiro Masuda*, Kazuhiko Suzuki* and Satoru Seto**

Abstract

One dimensional drift diffusion equation of photo-generated charge carriers in negatively biased high resistivity semiconductor detector materials is solved by a semi- Lagrangian- type advection scheme, constrained profile interpolation (CIP) method. Temporal evolution of the charge carrier distribution and the internal electric field obtained from the solution are used to reconstruct the experimental transient current waveforms measured by a time- of- flight (TOF) technique. Very good agreements of the theoretical results with the experimental current waveforms for several different bias voltages and excitation intensities for electron drift are confirmed. In addition, a good agreement of the present results with an independent theoretical approach, a Monte Carlo simulation of the charge carrier drift is also confirmed.

1. はじめに

飛行時間 (Time-of-flight, TOF) 法は様々な半導体材料のキャリア輸送特性の評価に古くから用いられている⁽¹⁾。II-VI 族化合物半導体 CdTe は、その物性からガンマ線検出器として優れた特性を示すことが期待され、1960 年代後半から盛んに研究が続けられている材料であり、この材料に亜鉛を 10% 程度加えた $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$ (CZT) も高性能ガンマ線検出器として使われている。これまで我々は、短パルスレーザーを励起源とする TOF 法により CdTe や CZT のキャリア輸送特性や移動度の温度依存性などについて検討をしてきた⁽²⁾。レーザーによる励起は α 線などの放射線による励起に比べていくつかの利点がある。例えば、レーザー照射とパルスバイアス印加のタイミングを制御できることから、欠陥準位からの熱放出に伴う空間電荷量の変化や、電極からの注入に起因するバンドベンディングの過程を観察できること、空間電荷濃度が低い試料では、試料内の電界を一様に保った状態で過渡電流の観測が可能であることなどである。また、 α 線励起で見られるプラズマ時間が存在せず、この結果キャリアドリフトの開始時間をより明確に定義できる。すなわち、観測される過渡電流波形は内部電界およびドリフト中のトラッピングやディトラッピングにのみ影響されることになり、適当な理論モデルに基づく計算結果との比較によって波形からこれらの量を推察可能である。

放射線検出器用 CdTe や CZT では、浅いトラップによる移動度の制限と深いトラップによるトラッピング寿命がキャリア分布の時間発展に対して支配的であることが報告されている⁽²⁾。数値解析を行う際には、これらの性質を記述する理論モデルに対しいくつかの適当な仮定をおき、TOF 法の測定に準じた条件のもとでキャリア密度に関するドリフト拡散方程式と内部電界に対するポアソン方程式を解くことになる。ところが、高電界 ($> 1000 \text{ V/cm}$) 下かつマクロ的な距離 ($> 1 \text{ mm}$) という輸送条件のもとで数値解析を行う場合には、通常の有限差分法では数値振動や数値拡散によりキャリア分布の時間発展を再現することが難しい。そのため、これまで、例えば理論モデルの計算にモンテカルロ (MC) シミュレーション⁽³⁾などが用いられてきた。今回はこの問題を解消する数値解析の手法として constrained profile interpolation (CIP) 法⁽⁴⁾を採用した。CIP 法は流体力学などの分野で広く用いられている高精度移流方程式の数値解法であり、対象とするキャリア密度分布とその空間微分が格子点上で連続であるという条件で移流方程式を解く方法である。我々は、この CIP 法を用いてドリフト拡散方程式を数値解析し、キャリア分布や内部電界の時間発展に基づく過渡電流波形を求めた。計算結果は励起強度の変化に伴う過渡電流波形の変化をよく再現し、MC 法による結果とも一致したため、その内容を本論文で報告する。

* 北海道科学大学大学院工学研究科電気電子工学専攻

** 石川工業高等専門学校電気工学科

2. 実験

今回シミュレーションする過渡電流波形は図 1 に示す TOF 測定系を用いて得たものである。キャリアの励起源としては短パルス Q スイッチレーザー（波長 335 nm, パルス幅 1 ns）を用いた。励起によって試料の入射側電極直下で発生する電荷量 Q [C] と、試料の静電容量 C [F] とバイアス V [V] の積の比 β を以下のように定義する⁽⁵⁾。

$$\beta = \frac{CV}{Q} \quad (1)$$

Neutral density (ND) フィルターを用いて励起強度を調節し、強励起状態 ($\beta \sim 1$) から、低励起状態 ($\beta \gg 1$) までの過渡電流波形を測定できるようになっている。なお、実際に入射表面直下で生成した電荷量を測定することはできないので、対向電極で収集された電荷量を用いて β を推定している。この推定は、キャリアの飛行時間 T_R に比べてキャリア寿命が十分長い場合には妥当である。

バイアスは 10 Hz, 100 μ s 程度のパルスで印加し、バイアス印加後 25 μ s でレーザーが試料に照射されるように全体のタイミングを制御している。試料内で発生した過渡電流は 50 Ω の抵抗で電圧信号に変換しデジタルオシロスコープ (5 Gs/s) に取り込んでいる。実験に用いた CZT 試料は平板状であり、大きさが 5 mm 角、厚さは 1 mm であり両面に金電極が蒸着されている。

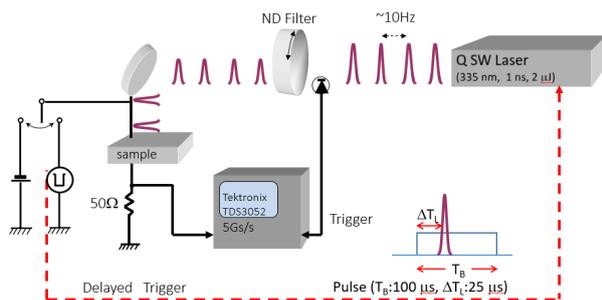


図 1 TOF 測定系

3. 1 次元ドリフト拡散方程式の数値解析

3.1.1 次元ドリフト拡散方程式の設定

今回のシミュレーションでは、電子の輸送に対して浅いトラップと深いトラップを含む平板状の試料を想定する。短パルスレーザーによって光入射面である陰極直下で生成した光キャリア（電子）はトラッピング、ディトラッピングを繰り返しながらバイアス電界によって対向電極へドリフトを開始す

る。検出器用半絶縁材料では、光生成電子濃度 $n(t)$ は暗状態の電子濃度 n_0 に比べて十分大きいと見なすことができ、加えて次の 3 つを仮定する。

- (1) 試料は一様である、
- (2) 平衡状態におけるトラップ濃度に比べて、実際にトラップされる電子濃度は十分小さい、
- (3) 浅いトラップと深いトラップ間の直接遷移はない、

また、光生成キャリア濃度の時間発展はドリフト拡散方程式により、

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}(\mu n E) + D_n \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} - \frac{\partial n_s}{\partial t} - \frac{\partial n_d}{\partial t} \quad (2)$$

と表される。このとき、 n [cm^{-3}] はキャリア密度、 μ [cm^2/Vs] は移動度、 D_n [cm^2/s] は拡散係数、 E [V/cm] は電界、 n_s [cm^{-3}] は浅いトラップに捕まったキャリアの密度、 n_d [cm^{-3}] は深いトラップに捕まったキャリアの密度である。ここでトラップにおける電荷の保存は、上記(2)の仮定より、

$$\frac{\partial n_s}{\partial t} = \frac{n}{\tau_s^+} - \frac{n_s}{\tau_s} \quad (3)$$

$$\frac{\partial n_d}{\partial t} = \frac{n}{\tau_d^+} - \frac{n_d}{\tau_d} \quad (4)$$

と表せる。このとき、 τ_s^+ [s] は浅いトラップへ捕獲されるまでの寿命、 τ_s [s] はそこからの熱脱離（ディトラッピング）時間、 τ_d^+ [s] と τ_d [s] は深いトラップに関する同様な関係を示す。これらの時定数は図 2 に示すトラップのエネルギー位置や濃度、その捕獲断面積に基づいて決定される^{(2), (6)}。トラッピングとディトラッピングに詳細平衡を仮定すると、例えば浅いトラップに対して以下の関係がある。

$$\frac{\tau_s^+}{\tau_s} = \frac{N_C}{N_S} e^{(-E_S/kT)} \quad (5)$$

ここで、 N_C は伝導帯の有効状態密度、 N_S は浅いトラップ密度、 E_S は浅いトラップのエネルギー、 k は Boltzmann 定数、 T は絶対温度である。但し、伝導帯下端のエネルギーを $E_C = 0$ と置いている。

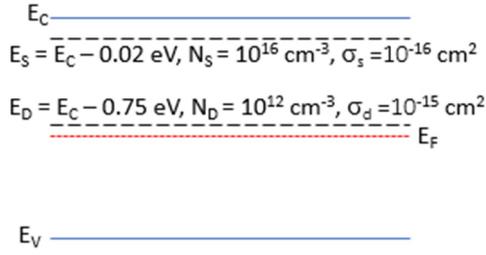


図2 想定しているトラップ準位^{(2), (6)}

前述した通り，高電界，マクロな距離の場合，通常の有限差分では数値振動や数値拡散が問題になる．これまではMC法を使ってきたが，今回はこの問題を解消するためにCIP法による数値解析を行った．CIP法とは流体力学などの分野で活用されている高精度移流方程式の数値解法である⁽⁴⁾．

まず，(2)式を次のように整理する．

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(nv) = D_n \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} - \frac{\partial n_s}{\partial t} - \frac{\partial n_d}{\partial t} \equiv h \quad (6)$$

ここで $v = \mu E$ [cm/s] はキャリアのドリフト速度である．速度の空間微分を右辺に移すと，

$$\frac{\partial n}{\partial t} + v \frac{\partial n}{\partial x} = h - n \frac{\partial v}{\partial x} \equiv H \quad (7)$$

となる．CIP法ではキャリア濃度分布関数 $n(x, t)$ を空間に関する3次の多項式で近似し， n とその空間微分が，格子点上で連続であると定めて計算を進める．(6)式の空間微分は，

$$\frac{\partial(\partial_x n)}{\partial t} + v \frac{\partial(\partial_x n)}{\partial x} = \partial_x H - \frac{\partial n}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial x} \quad (8)$$

となる．CIP法では(6)，(7)式を以下のように移流相と非移流相に分けて計算を進める．移流相は

$$\frac{\partial n}{\partial t} + v \frac{\partial n}{\partial x} = 0 \quad (9)$$

$$\frac{\partial(\partial_x n)}{\partial t} + v \frac{\partial(\partial_x n)}{\partial x} = 0 \quad (10)$$

となり，非移流相は

$$\frac{\partial n}{\partial t} = H \quad (11)$$

$$\frac{\partial(\partial_x n)}{\partial t} = \partial_x H - \frac{\partial n}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial x} \quad (12)$$

となる．(1)で定義した β が1に近づくと，内部電界に対してドリフトキャリアの空間分布が強く影

響を及ぼすことになり，実際の計算では，移流のステップ毎に以下のポアソン方程式を解いて電界を更新した．

$$-\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = \frac{\partial E}{\partial x} = \frac{\rho}{\epsilon} = -\frac{q}{\epsilon}(n - p + N) \quad (13)$$

ここで， ϵ [F/cm] は誘電率， ρ [C/cm²] は電荷密度， ϕ [V] は電位， E [V/cm] は電界， q [C] は素電荷であり， $N = N_A^- - N_D^+$ には上記のトラップに捕獲された電荷も含む．但し， $\epsilon = \epsilon_r \epsilon_0$ であり， ϵ_r は比誘電率， ϵ_0 [F/cm] は真空の誘電率である．試料は高抵抗 (10¹⁰ Ωcm) のため，電子ドリフトの際には $n \gg p \approx 0$ として扱う．

ここで，初期条件と境界条件について考えるため，便宜上，空間方向に対し，レーザーが入射する試料表面の位置を系の左端，対向電極はその右側 L だけ離れた場所に位置しているとする．すなわち計算上，試料は右側に十分大きいとして，右側電極における分布は $x = L$ の位置の値をそのまま用いている．今回のような紫外光域のレーザーによる励起の場合は，そのエネルギーは試料のエネルギーギャップより十分大きく，光の侵入長はせいぜい1波長 (0.3 μm) 程度であり，光生成したキャリア濃度は表面から指数関数的に減衰する．一方，表面に近い程表面再結合による損失は大きいと考えられる．この結果，キャリア密度の初期条件として，試料表面からわずかに内部に入った位置を中心とするガウス分布を設定し，系の左端より外にはみ出た部分は無視して扱うことにする．

3.2 CIP法による数値解析

以後空間と時間に関する差分を行い，前述の通りCIP法は3次の多項式で近似するため，補間式は次のように仮定する．

$$N(x) = a(x - x_i)^3 + b(x - x_i)^2 + c(x - x_i) + d \quad (14)$$

また，CIP法では上式の補間関数の風上2点 (計算点と風上1点) と上式を空間微分した関数の風上2点を使い，3次関数を構築する．よって(14)式を微分した

$$\partial_x N(x) = 3a(x - x_i)^2 + 2b(x - x_i) + c \quad (15)$$

を導入する．ここで，未定係数 a, b, c, d を， $N(x_i) = n_i^j$ ， $\partial_x N(x_i) = \partial_x n_i^j$ ， $N(x_{i-1}) = n_{i-1}^j$ ， $\partial_x N(x_{i-1}) =$

$\partial_x n_{i-1}^j$ から決定すると,

$$a = -\frac{2(n_i^j - n_{i-1}^j)}{dx^3} + \frac{\partial_x n_i^j + \partial_x n_{i-1}^j}{dx^2} \quad (16)$$

$$b = -\frac{n_i^j - n_{i-1}^j}{dx^2} + \frac{2\partial_x n_i^j + \partial_x n_{i-1}^j}{dx} \quad (17)$$

$$c = \partial_x n_i^j \quad (18)$$

$$d = n_i^j \quad (19)$$

となる。このとき、 n_i^j 、 $\partial_x n_i^j$ はそれぞれ n 、 $\partial_x n$ を空間と時間について離散化させたときの、空間 i 番目、時間 j 番目の値を表す。ここで (9) 式のような移流方程式には $n(x, t) = n(x - v\Delta t, 0)$ という関係が成り立つ。よって (14), (15) 式は次のように書き換えられる。

$$\begin{aligned} n_i^* &= N(x_i - vt) \\ &= a(-v\Delta t)^3 + b(-v\Delta t)^2 + c(-v\Delta t) + d \end{aligned} \quad (20)$$

$$\begin{aligned} \partial_x n_i^* &= \partial_x N(x_i - vt) \\ &= 3a(-v\Delta t)^2 + 2b(-v\Delta t) + c \end{aligned} \quad (21)$$

但し n_i^* は移流操作のみを行った中間状態における n_i^j とする。ここで、 $z = -v\Delta t$ とおき、 i 番目の z を電界 E を使って表現すると下式のようなになる。

$$z_i = -\mu \frac{E_i^j + E_{i-1}^j}{2} \Delta t \quad (22)$$

非移流相の式 (11) に (11), (3), (4) 式を代入し、差分で近似すると以下のようなになる。

$$\begin{aligned} \frac{n_i^{j+1} - n_i^j}{\Delta t} &= D_n \frac{n_{i+1}^j - 2n_i^j + n_{i-1}^j}{\Delta x^2} - \frac{n_i^j}{\tau_s^+} + \frac{n_{s,i}^j}{\tau_s} \\ &\quad - \frac{n_i^j}{\tau_d^+} + \frac{n_{d,i}^j}{\tau_d} - n_i^j \frac{v_{i+1} - v_{i-1}}{2\Delta x} \end{aligned} \quad (23)$$

また、 H は (11) 式を差分近似すると

$$\frac{n_i^{j+1} - n_i^j}{\Delta t} = H \quad (24)$$

となる。よって、(12) 式も (11) 式と同様に差分近似すると、次のように表される。

$$\begin{aligned} \frac{\partial_x n_i^{j+1} - \partial_x n_i^j}{\Delta t} &= \frac{n_{i+1}^{j+1} - n_{i+1}^j - n_{i-1}^{j+1} + n_{i-1}^j}{\Delta t \cdot 2\Delta x} \\ &\quad - \partial_x n_i^j \frac{v_{i+1} - v_{i-1}}{2\Delta x} \end{aligned} \quad (25)$$

(23), (25) 式を整理すると,

$$\begin{aligned} n_i^{j+1} &= n_i^j \left(1 - \frac{\Delta t}{\tau_s^+} - \frac{\Delta t}{\tau_d^+} - \Delta t \mu \frac{E_{i+1}^j - E_{i-1}^j}{2\Delta x} \right) \\ &\quad + \frac{\Delta t}{\tau_s} n_{s,i}^j + \frac{\Delta t}{\tau_d} n_{d,i}^j \\ &\quad + D_n \Delta t \frac{n_{i+1}^j - 2n_i^j + n_{i-1}^j}{\Delta x^2} \end{aligned} \quad (26)$$

$$\begin{aligned} \partial_x n_i^{j+1} &= \partial_x n_i^j + \frac{n_{i+1}^{j+1} - n_{i+1}^j - n_{i-1}^{j+1} + n_{i-1}^j}{2\Delta x} \\ &\quad - \partial_x n_i^j (-\mu) \frac{E_{i+1}^j - E_{i-1}^j}{2\Delta x} \Delta t \end{aligned} \quad (27)$$

となる。更に浅いトラップと深いトラップに捕まったキャリア密度 $n_{s,i}^j$ 、 $n_{d,i}^j$ は (3), (4) 式を差分化し整理すると,

$$n_{s,i}^{j+1} = n_{s,i}^j \left(1 - \frac{\Delta t}{\tau_s} \right) + \frac{\Delta t}{\tau_s^+} n_i^j \quad (28)$$

$$n_{d,i}^{j+1} = n_{d,i}^j \left(1 - \frac{\Delta t}{\tau_d} \right) + \frac{\Delta t}{\tau_d^+} n_i^j \quad (29)$$

と表される。したがって、今回の数値計算で使用されるキャリア密度に関する式は以下のようにまとめられる。

- 移流相

$$n_i^* = az^3 + bz^2 + \partial_x n_i^j z + n_i^j$$

$$\partial_x n_i^* = 3az^2 + 2bz + \partial_x n_i^j$$

但し,

$$a = -\frac{2(n_i^j - n_{i-1}^j)}{dx^3} + \frac{\partial_x n_i^j + \partial_x n_{i-1}^j}{dx^2}$$

$$b = -\frac{n_i^j - n_{i-1}^j}{dx^2} + \frac{2\partial_x n_i^j + \partial_x n_{i-1}^j}{dx}$$

$$z = -\mu \frac{E_i^j + E_{i-1}^j}{2} \Delta t$$

● 非移流相

$$n_i^{j+1} = n_i^* \left(1 - \frac{\Delta t}{\tau_s^+} - \frac{\Delta t}{\tau_d^+} - \Delta t \mu \frac{E_{i+1}^j - E_{i-1}^j}{2\Delta x} \right) + \frac{\Delta t}{\tau_s} n_{s,i}^j + \frac{\Delta t}{\tau_d} n_{d,i}^j + D_n \Delta t \frac{n_{i+1}^* - 2n_i^* + n_{i-1}^*}{\Delta x^2}$$

$$\partial_x n_i^{j+1} = \partial_x n_i^* + \frac{n_{i+1}^{j+1} - n_{i+1}^* - n_{i-1}^{j+1} + n_{i-1}^*}{2\Delta x} - \partial_x n_i^* (-\mu) \frac{E_{i+1}^j - E_{i-1}^j}{2\Delta x} \Delta t$$

但し,

$$n_{s,i}^{j+1} = n_{s,i}^j \left(1 - \frac{\Delta t}{\tau_s} \right) + \frac{\Delta t}{\tau_s^+} n_i^*$$

$$n_{d,i}^{j+1} = n_{d,i}^j \left(1 - \frac{\Delta t}{\tau_d} \right) + \frac{\Delta t}{\tau_d^+} n_i^*$$

3.3 ポアソン方程式の解法

一般的な TOF 測定は $\beta = \infty$, すなわち, ドリフトするキャリアの電荷量は十分小さく, 外部から印加されたバイアス電界に影響を及ぼさないことが前提で進められる. 一方 $\beta \approx 1$ のような強励起の状態については, 古くからヨウ素や硫黄結晶の過渡電流波形が調べられており, ドリフトする電荷の運動によって, 内部電界が影響を受けることが報告されている. 前者を space charge free (SCF) 状態, 後者を space charge perturbation (SCP) 状態と呼んでいる. 本研究では移流計算の各ステップにおいて, ポアソン方程式を解き, 電界を数値計算した. (13) 式を差分化し整理すると,

$$\varphi_{i+1} - 2\varphi_i + \varphi_{i-1} = \frac{q}{\varepsilon} n_{e,i} \Delta x^2 \quad (30)$$

となる. 但し,

$$n_{e,i} = n - p + N \quad (31)$$

である. ここで, 境界条件として, 両極板上の電位を

$$\varphi(x_0) = \varphi_0 \quad (32)$$

$$\varphi(x_M) = \varphi_M \quad (33)$$

とすると, i の取りうる範囲は 1 番目から $M-1$ 番目までとなる. よって (30) 式を i の取りうる範囲で, 行列の形で表現すると,

$$A \begin{bmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \\ \varphi_3 \\ \vdots \\ \varphi_{M-1} \end{bmatrix} = \frac{q}{\varepsilon} \Delta x^2 \begin{bmatrix} n_{e,1} \\ n_{e,2} \\ n_{e,3} \\ \vdots \\ n_{e,M-1} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \varphi_0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ \varphi_M \end{bmatrix} \quad (34)$$

となる. ここで,

$$A = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & -1 & 2 & -1 \\ 0 & \cdots & 0 & -1 & 2 \end{bmatrix} \quad (35)$$

$$E = -\frac{\partial \varphi}{\partial x} \quad (36)$$

である. 以上の数値解析には MATLAB R2017 を利用した.

4. 結果

図 3 の実線はバイアス電圧を 200V 一定に保ち, レーザーによる励起強度を $Q = 10$ pC から $Q = 272$ pC まで徐々に変化させた場合の過渡電流波形である. 図より明らかなように生成電荷量 Q の増加に伴って, 電流のプラトー部分は右上りの波形となり, $Q = 184$ pC 以上では顕著な角(cusp)が確認される.

図中の一点鎖線は MC 法によるシミュレーションであり, 過去の報告⁽²⁾に基づいてドリフト移動度 $\mu = 1070$ cm² / Vs, 浅いトラップ時間 $\tau_s^+ = 35$ ns, デイトラップ $\tau_s = 2$ ns (但し $Q = 184$ pC, 272 pC では $\tau_s = 3$ ns), 深いトラップ時間を $\tau_d^+ = 1.2$ μ s と設定し, 励起強度のみを変化させてフィッティングされている. この結果は, 生成, ドリフトする電荷量の増加に伴って, ほぼ内部電界と印加電界が一致

する SCF 状態から、内部電界がキャリア電荷の影響を受ける SCP 状態への移行によるものであることが報告されている⁽⁷⁾。同様な実験結果は過去に硫黄⁽⁸⁾やヨウ素結晶⁽⁹⁾で報告されているが、理論計算は限定された条件下でのみ行われており⁽⁵⁾、トラッピングやディトラッピングの影響についての詳細な議論はこれまでなされていなかった。

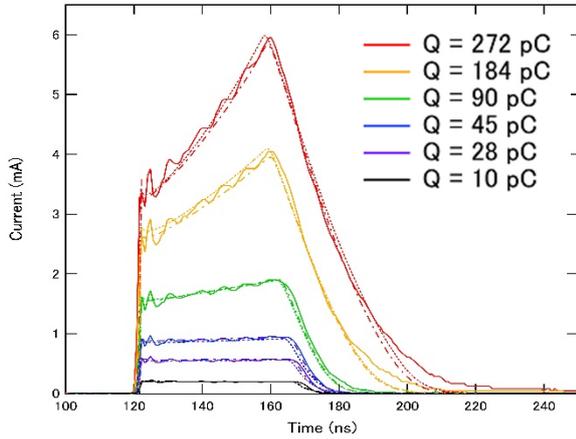


図3 過渡電流波形のシミュレーション結果
(CIP 点線および MC 一点鎖線)

図中の点線は SCF 状態から SCP 状態までの励起強度に対し、CIP 法によってキャリア密度と内部電界の時間発展を数値解析し、それに基づき行った過渡電流波形のシミュレーション結果である。差分の大きさは、 $\Delta t = 0.05$ ns、 $\Delta x = 1$ μ m としたが、これらは移流部分における安定性条件 (CFL 条件)

$$v \frac{\Delta t}{\Delta x} < 1 \quad (37)$$

を満たすように設定している。また、数値計算における過渡電流 I_T は、試料の厚さを L としたとき

$$I_T = \frac{1}{L} \int_0^L qn\mu E dx \quad (38)$$

を差分化して計算した。このときにも計算には MC 法と同じパラメータを用い、やはりそれぞれの励起強度だけを変化させている。その結果、励起強度が低い場合だけでなく高い場合にも実験値の波形および MC 法の結果と CIP 法の数値解の波形はよく一致する結果であることがわかる。なお、 $Q = 184$ pC と 272 pC の裾部分は CIP、MC いずれの計算結果も実験波形に比べて広がりが小さく、一致は良くない。この原因として、このような高励起の場合には、先に示した (2) 平衡状態におけるトラップ濃度に比べて、実際にトラップされる電子濃度は十分小さいという仮定が妥当ではない可能性を示している。実際、高励起強度 ($Q = 184$ pC および 272 pC)

のフィッティングでは τ_s を 3 ns に変更している。詳細な議論ではないが、高励起の場合に τ_s の値が大きくなる理由は次のように説明される。ディトラッピング時間 τ_s は、

$$\tau_s = \frac{1}{N_C \sigma v_{th}} \exp\left(\frac{E_S}{kT}\right) \quad (39)$$

で与えられる。ここで N_C は伝導体有効状態密度、 σ は捕獲断面積、 v_{th} はキャリアの熱速度、 E_S はトラップのエネルギーである。図 2 のように弱励起の場合浅いトラップ準位は伝導帯から 0.02 eV の深さにあるが、励起強度が高くなり伝導帯におけるキャリア密度が非常に高くなると実効的に E_S が大きくなることが予想される。この増加が 0.01 eV 程度の場合、上式により τ_s は 3 ns 程度と計算される。

上記の点を除けば、例えば cusp の位置などを含めて、独立な二つの理論計算結果がよく一致して実験結果を説明していることから、CIP 法に基づくキャリア密度と内部電界の時間発展の数値解析結果の妥当性は高いといえる。そこで次に SCF、SCP 状態、それぞれの場合に、CIP 法によるキャリア密度分布と内部電界の時間発展の解析結果を検討してみる。

図 4 ~ 図 7 は SCF、SCP 状態それぞれの CIP 法による数値解のキャリア密度分布の時間発展、内部電界の時間発展を描いたものである。SCF 状態におけるキャリア密度の時間発展 (図 4a) では、陰極で発生したキャリアがトラッピング、ディトラッピングによって徐々にその分布が広がりながら対向電極に向かってドリフトしていく過程が示されている。陰極側に顕著に観測される非対称なテールはトラッピングされて対向電極に到達するのが遅れるキャリアの存在 (図 4b, 4c) を示している。また、励起強度が小さい場合の内部電界 (図 6) はキャリア分布の両端に対応する小さなステップが確認されるが、ほぼ一様であり、外部から印加されたバイアス電圧がほぼ反映された大きさとなる。この結果、波形の減衰は深いトラップによるキャリア寿命 (τ_d^+) のみに依存することとなる。今の場合 τ_d^+ はキャリアの飛行時間 T_R に比べて十分長いことからキャリアのほぼ全数が対向電極に到達するため、観測される電流波形はプラトーを形成する (図 3 の $Q = 10$ pC を参照)。

一方、SCP 状態では生成キャリアによって電界が遮蔽され、キャリア分布の両側で電界の大きさが異

なることが、図 6, 7 よりわかる。この結果、先端（陽極）側のドリフト速度が大きく後端（陰極）側のドリフト速度が小さいという速度分散が生じ、分布は時間の経過とともに更に広がる。過渡電流波形

にみられる cusp は分布の最先端が対向電極に到達する時間に対応することを表しており、その後、幅が大きく広がった低速度成分が対向電極に到達する結果、波形は大きなテールを形成することになる。

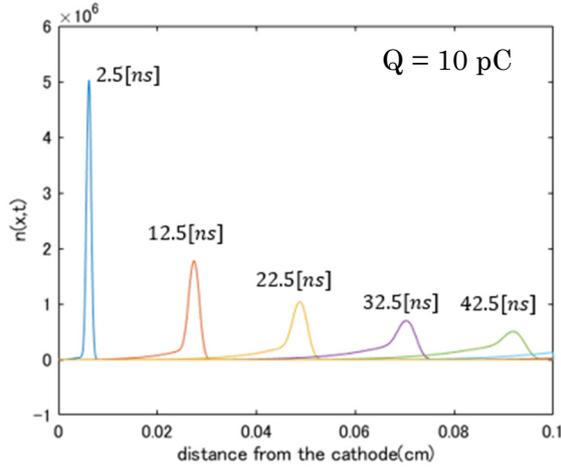


図 4a SCF 状態のキャリア密度の時間発展

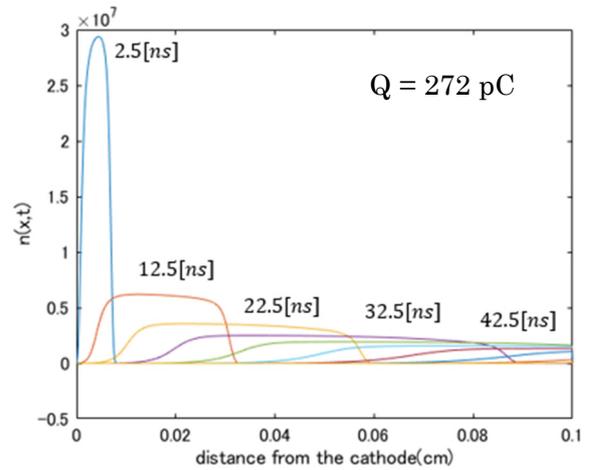


図 5a SCP 状態のキャリア密度の時間発展

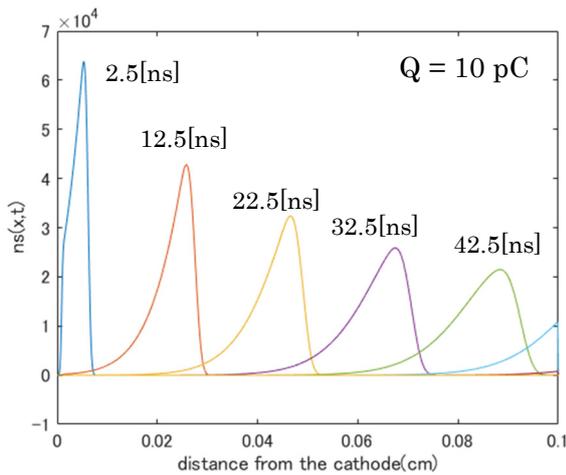


図 4b SCF 状態の浅いトラップ密度の時間発展

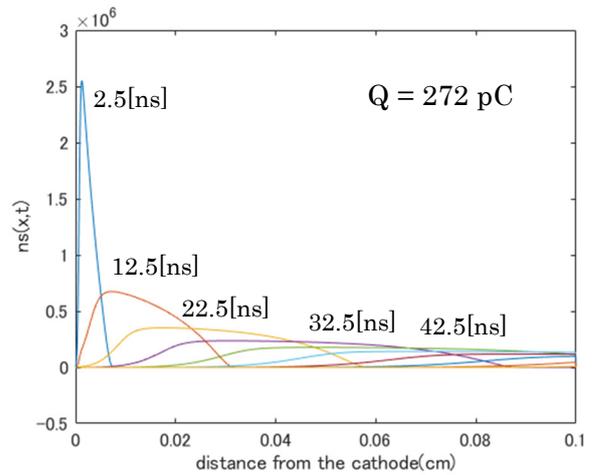


図 5b SCP 状態の浅いトラップ密度の時間発展

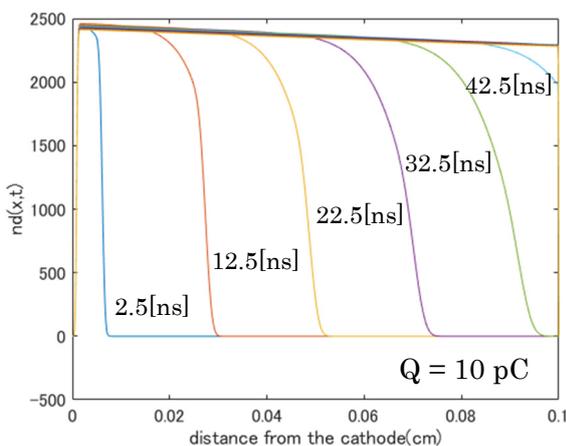


図 4c SCF 状態の深いトラップ密度の時間発展

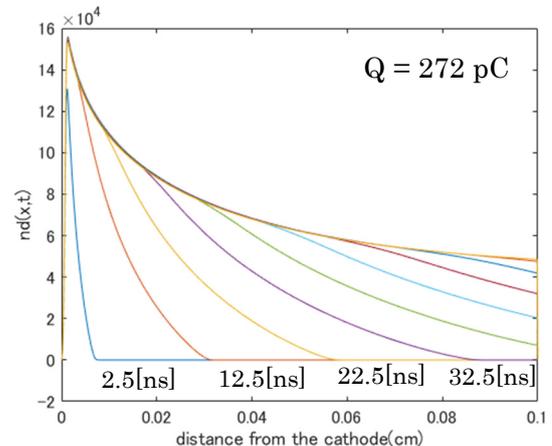


図 5c SCP 状態の深いトラップ密度の時間発展

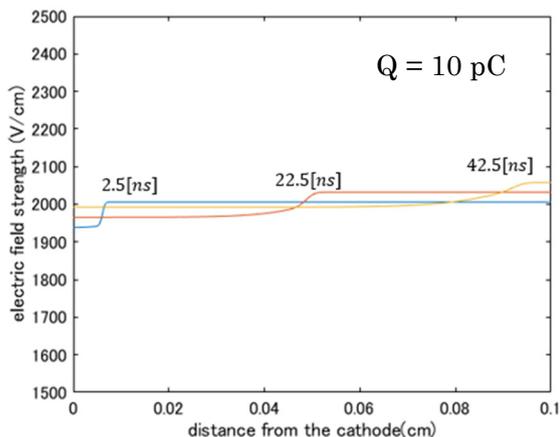


図 6 SCF 状態の内部電界の時間発展

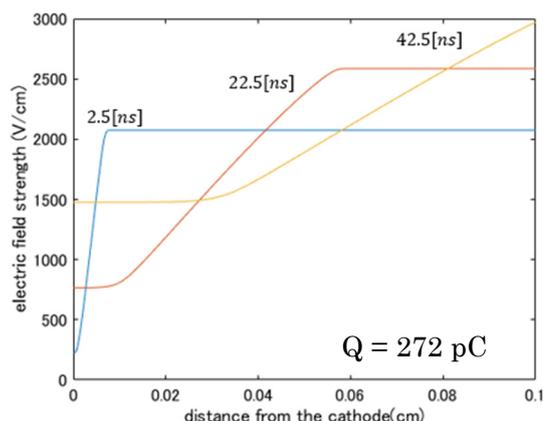


図 7 SCP 状態の内部電界の時間発展

5. まとめ

CIP 法によって、SCF および SCP 状態におけるキャリア分布と内部電界の時間発展を計算し、これに基づいて得られた過渡電流波形は TOF 法による実験結果を良く再現し、MC 法とも一致することを示した。これにより、CIP 法によるシミュレーション結果の妥当性が確認できた。MC 法の場合、計算精度は実行時間とのトレードオフとなるのに対して CIP 法の場合そのような問題はない。また、MATLAB を用いたコードの記述も簡便であり、わずか 150 行程度のプログラムで全体の計算、グラフ出力が可能である。特にポアソン方程式の計算にはスパース行列の処理が必要になるが、これもあらかじめ組み込まれた関数によって非常に簡便である。

今後の課題として、励起強度が高い場合の過渡電流波形のテール部分の再現性向上が求められる。原因としては、仮定(2)の妥当性に問題があると考えられ、浅いトラップにおける電荷保存の式(3)の見直しを検討する必要がある。また、今回は空間をキャリアドリフト方向の 1 次元として扱ったが、空間を 2 次元に拡張することにより結晶試料の不均一性や端面におけるトラップ、非対称電極構造などの興味ある問題も取り扱うことが可能となる。

参考文献

- (1) W. E. Spear, J. Non-Cryst. Solids 1, 197- (1969).
- (2) K. Suzuki et al., IEEE TNS 49, 1287- (2002).
- (3) K. Suzuki et al., IEEE TNS 58, 1958- (2011).
- (4) H. Takewaki and T. Yabe, J. Comp. Phys. 70, 355- (1987).

- (5) A. C. Papadakis, J. Phys. Chem. Solids 28, 641 (1967).
- (6) R. Grill et al., 19 RTSD R10-7 (2012).
- (7) K. Suzuki et al., J. Elec. Mat., DOI 10.1007/s11664-018-6245-2.
- (8) D. J. Gibbons and A. C. Papadakis, J. Phys. Chem. Solids 29,115- (1968).
- (9) A. Many et al., J. Phys. Chem. Solids 22, 285 (1961).