ポアソン方程式

波多腰玄一

1 はじめに

ポアソン方程式は2階の偏微分方程式で，電磁気学や熱伝導などの方程式に現れる。半導体では，電子，ホールの状態を記述する基礎方程式の一つである。以下ではその導出と半導体におけるキャリヤー密度との関係について述べる。

2 ポアソン方程式の導出

ポアソン方程式は，マクスウェル方程式の一つであるガウスの法則から導くことができる。第1章の式(3)，(5)を再掲すると

$$\nabla \cdot \boldsymbol{D} = \rho \tag{1}$$

$$\boldsymbol{D} = \varepsilon \boldsymbol{E} \tag{2}$$

式(1)はガウスの法則で，$\boldsymbol{D}$は電束密度，ρは電荷密度である。また$\boldsymbol{E}$は電界，εは誘電率である。静電ポテンシャル（スカラーポテンシャル）ψを用いて

$$\boldsymbol{E} = -\nabla \psi \tag{3}$$

と表すと，式(1)〜(3)より

$$\nabla \cdot (\varepsilon \nabla \boldsymbol{E}) = -\rho \tag{4}$$

この式(4)がポアソン方程式である。半導体の場合，電荷密度は電子密度n，ホール密度p，イオン化されたドナー不純物の密度N_{D}^{+}，イオン化されたアクセプター不純物の密度N_{A}^{-}がある。それぞれの電荷の正負を考慮すると，ρは次式で表される。

$$\rho = e(p - n + N_{\mathrm{D}}^{+} - N_{\mathrm{A}}^{-}) \tag{5}$$

式(4)，(5)より

$$\nabla \cdot (\varepsilon \nabla \psi) = -e(p - n + N_{\mathrm{D}}^{+} - N_{\mathrm{A}}^{-}) \tag{6}$$

3 エネルギーバンドとの関係

式(6)右辺の変数n，p，N_{D}^{+}，N_{A}^{-}は前章で既に定義されている。しかし左辺のψは今回初めて現れた。このψがエネルギーバンド（例えば第21章の図3〜図5）とどのような関係にあるかを示す必要がある。ψは静電ポテンシャルであるから，バンド端のエネルギー準位と平行になるはずである。そこで例えば伝導帯端E_{c}の位置をψとすることが考えられる。しかしこの場合，異なる材料の界面では真空準位に対する伝導帯端の差ΔE_{c}だけの段差が生じてしまう。ψは界面でも連続なので，このΔE_{c}をキャンセルする必要がある。伝導帯端と真空準位の差は電子親和力χなので，このχを差し引いて伝導帯端と平行な位置の電位をψとすればよい。

図1にエネルギーバンドとψとの関係を示した。以前にも述べたように，エネルギーバンドは電子のエネルギーを基準としているため，上が負である。したがってψの符号は逆になることに注意する必要がある。E_{c}とψとの関係は以下のようになる。