T2R2 東京科学大学 リサーチリポジトリ
Science Tokyo Research Repository

論文 / 著書情報
Article / Book Information

題目(和文)	誘電体中の電荷現象に対するホッピング数値計算法の開発とその応用
Title(English)	
著者(和文)	岩本光正
Author(English)	MITSUMASA IWAMOTO
出典(和文)	学位:工学博士, 学位授与機関:東京工業大学, 報告番号:甲第1266号, 授与年月日:1981年3月26日, 学位の種別:課程博士, 審査員:
Citation(English)	Degree:Doctor of Engineering, Conferring organization: , Report number:甲第1266号, Conferred date:1981/3/26, Degree Type:Course doctor, Examiner:
学位種別(和文)	博士論文
Type(English)	Doctoral Thesis

Powered by T2R2 (Science Tokyo Research Repository)

誘電体中の電荷現象に対するホッピング数値計算法の開発とその応用

提出年月　昭和55年12月

指導教官　日野 太郎 教授

提出者　東京工業大学大学院理工学研究科
博士課程 電気工学専攻
岩本 光正

東京工業大学 450627

緒言

誘電体は電気・電子材料として導体・半導体と共に各所で用いられ，電気・電子技術の進歩に従い要求される性能も一段と高まっている。例えば超高圧直流ケーブルでは，実用化に伴ない絶縁耐圧の向上など性能の改善が要求されている。このような問題の解決には誘電体を物性的立場より把握することが重要となろうが，とりわけ誘電体中の荷電粒子の挙動に関する知見を得ることは，絶縁特性や破壊特性さらに誘電特性など材料の電気的特性を評価する上で重要である。

誘電体中の荷電粒子の挙動は，双極子分極に代表される電荷が微視的に変位する場合と，イオンなどのように試料中を巨視的に移動する場合の二通りに大きく分けられる。そして，前者が空間電荷電界を形成しないこと，後者がそれを形成することが大きな差異と考えてよい。前者についてはデバイ理論でその扱いはほぼ定着しているとみられる。一方，後者に対してはポアソンの式で空間電荷電界を考慮し，拡散とドリフト電流からなる電流連続の式により扱かわねばならない。けれども，このような理論的取扱いをすることは困難で，一般には一部の効果を無視して解析されている。しかし，このような簡単化をすることなく取扱うことが可能となれば，誘電体に関する特殊な現象が解明されるばかりでなく絶縁設計などにも応用できると考えられ，工学的価値も高い。さらに，この場合の電導現象を記述する方程式は半導体中の電子や正孔の運動を表わす式と基本的に一致している。このことは半導体も扱かえることを意味し，応用範囲は一層広がるものと期待される。

本論文は，こうした観点から誘電体中の空間電荷を形成する荷電粒子による拡散とドリフトからなる電導現象に対するホッピング数値計算法を提案し，空間電荷電界下における荷電粒子の挙動について物性的立場および工学的立場から総合的に研究を行なったものである。すなわち，物性的立場からは誘電体中

における定常，過渡状態におけるイオン伝導現象や空間電荷制限電流などの電子伝導現象並びに空間電荷分極による誘電分散や熱刺激電流などの諸問題について，上記の数値計算法を用いて研究したものである。また，絶縁設計などの工学的な応用の立場からは，二次元ポアソン場における電界計算やＭＩＳ構造素子中の空乏層の電界計算などの問題への同上の数値計算法の適用を検討したものである。本研究は，誘電体の空間電荷特性についての物性的研究並びに工学的応用の基礎として非常に有効であると考えられる。

目　次

緒　言

第1章　総論

1－1　まえがき　1

1－2　誘電体の空間電荷特性とその扱い　2

1－3　本研究の目的と概要　6

1－4　まとめ　8

第2章　ホッピング数値計算法による誘電体中の空間電荷特性の解析法に関する研究

2－1　まえがき　10

2－2　一次元ホッピングモデル　11

2－3　一次元ホッピングモデルの拡張　16

2－4　二次元ホッピングモデル　19

2－5　二次元ホッピングモデルの拡張　22

2－6　ホッピング数値計算法の等価回路　24

2－7　ホッピング数値計算法の有効性について　25

2－8　まとめ　26

第3章　定常状態におけるイオン空間電荷分布並びに分極の解析

3－1　まえがき　27

3－2　基本方程式　27

3－3　数値計算のための解析と計算例　29

3－4　厚い膜に対する取扱い　37
3－5　収束法による電荷分布の計算　41
3－6　まとめ　43

第4章　イオン過渡電流の解析とそのホッピングパラメータ測定への応用に関する研究
4－1　まえがき　44
4－2　基本方程式　44
4－3　解析　46
4－4　数値計算例　52
4－5　ホッピング数値計算法の他への応用　58
4－6　まとめ　63

第5章　誘電体における空間電荷分極電流の取扱いと印加電圧極性反転電流に関する研究
5－1　まえがき　64
5－2　解析　64
5－3　印加電圧極性反転電流と分極特性　74
5－4　まとめ　81

第6章　絶縁体中の電子伝導現象に対するホッピング数値計算法の応用
6－1　まえがき　82
6－2　ホッピングモデルによるポアソンの式を考慮したドリフト電流の扱い　82
6－3　空間電荷制限電流の数値計算例　88
6－4　注入電極面電界零の条件について　95
6－5　まとめ　97

第7章　拡散と電極界面電界を考慮した電子伝導現象の解析に関する研究

7－1　まえがき　98

7－2　高電圧印加に対するホッピング数値計算法の電流を表わす式　99

7－3　吸収電荷と電極面電界　103

7－4　SCLCの数値解析のための関係式　104

7－5　ポリエチレンフィルムについての解析結果　105

7－6　実効移動度と注入電極界面電界の評価　109

7－7　膜厚の異なるポリエチレンフィルムの評価　111

7－8　ケーブルの絶縁設計への応用　116

7－9　まとめ　123

第8章　過渡電子伝導現象の解析に関する研究

8－1　まえがき　124

8－2　過渡空間電荷制限電流に対するホッピング数値計算法の扱い　125

8－3　数値解析例

8－4　過渡空間電荷制限電流についての検討　134

8－5　電荷減衰現象の扱い　140

8－6　まとめ　142

第9章　空間電荷分極による誘電分散の研究

9－1　まえがき　143

9－2　小信号に対する扱かい－誘電分散を示す式　144

9－3　一次元におけるクラマース・クローニッヒの関係　148

9－4　数値計算例と検討　151

9－5　大信号に対する扱い－誘電特性の解法　158
9－6　大信号交流応答の数値解析例　162
9－7　大信号交流応答に対する検討　167
9－8　まとめ　169

第10章　一般絶縁材料の空間電荷分極による誘電分極の解析
10－1　まえがき　171
10－2　二層誘電体に対するホッピング数値計算法の扱い　172
10－3　定常解析と数値計算例　176
10－4　多層誘電体の扱かい　181
10－5　まとめ　183

第11章　一般誘電材料系における空間電荷分極による誘電分散に関する研究
11－1　まえがき　185
11－2　一般誘電体材料系に対するホッピング数値計算法の基本式　185
11－3　一般誘電体材料に対する小信号解析　187
11－4　ポテンシャル関数の小信号応答　191
11－5　一般誘電体材料におけるクラマース・クローニッヒの関係　193
11－6　空間電荷分極の誘電率　194
11－7　まとめ　196

第12章　二次元ポアソン場の数値解析に関する研究
12－1　まえがき　197
12－2　二次元ホッピング数値計算法の基本方程式と境界条件

198

12-3 電荷数とポテンシャルの関係 199

12-4 解析方法 208

12-5 数値解析例 209

12-6 ホッピング数値計算法の等価回路モデル 214

12-7 ユニットによる遷移マトリクスの合成について 226

12-8 ユニットを単位とするホッピング数値計算法の基本方程式について 231

12-9 まとめ 232

第13章 イオン空間電荷分極TSCの研究

13-1 まえがき 233

13-2 イオン空間電荷分極TSCの解析 234

13-3 TSC計算例 235

13-4 MIS試料のイオン空間電荷分極TSCの測定と物性定数の決定 239

13-5 イオン空間電荷分極TSCについての検討 244

13-6 ランプ電圧印加によるMIS過渡電流特性 248

13-7 まとめ 250

第14章 MIS構造素子の空乏層電界解析へのホッピング数値計算法の応用

14-1 まえがき 252

14-2 半導体電導現象に対する基本方程式 253

14-3 電導現象に対する基本方程式とホッピング方程式の関係 255

14-4 ホッピング数値計算法における基本方程式の作成 259

14-5 MIS構造素子中の空乏層電界の解析 260
14-6 空乏層電界の計算例 263
14-7 まとめ 266

第15章 熱刺激表面電位によるMIS界面準位の測定法に関する研究
15-1 まえがき 267
15-2 MIS界面準位のTSSpと理論 268
15-3 実験 275
15-4 TSSpおよびV_c～T_s特性 276
15-5 TSSpによる界面準位の評価 280
15-6 検討 286
15-7 まとめ 291

第16章 結論 292

謝辞 296
付録 297
参考文献 339
本研究に関する発表文献 345

第1章 総論

1-1 まえがき[1]~[8]

誘電体は電気・電子材料として導体，半導体と共に各所で用いられ，電気・電子技術の進歩に従い要求される性能も一段と高まっている。例えば超高圧直流ケーブルでは，実用化に伴ない絶縁耐圧の向上など性能の改善が要求されている。[3~6] このような問題の解決には誘電体を物性的立場より把握することが重要となろうが，とりわけ誘電体中の荷電粒子の挙動に関する知見を得ることは，絶縁特性や破壊特性さらに誘電特性など材料の電気的特性を評価する上で重要である。

誘電体中の荷電粒子の挙動は，双極子分極に代表される電荷が微視的に変位する場合と，イオンなどのように試料中を巨視的に移動する場合の二通りに大きく分けられる。そして，前者が空間電荷電界を形成しないこと，後者がそれを形成することが大きな差異と考えてよい。前者についてはデバイ理論でその扱いはほぼ定着しているとみられる。[7] 一方，後者に対してはポアソンの式で空間電荷電界を考慮し，拡散とドリフト電流からなる電流連続の式により扱かわねばならない。けれども，このような理論的取扱いをすることは困難で，一般には一部の効果を無視して解析されている。[8] しかし，このような簡単化をすることなく取扱うことが可能となれば，誘電体に関する特殊な現象が解明されるばかりでなく絶縁設計などにも応用できると考えられ，工学的価値も高い。さらに，この場合の電導現象を記述する方程式は半導体中の電子や正孔の運動を表わす式と基本的に一致している。このことは半導体も扱かえることを意味し，応用範囲は一層広がるものと期待される。

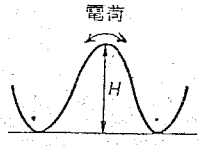
本論文は，こうした観点から誘電体中の空間電荷を形成する荷電粒子による拡散とドリフトからなる電導現象に対するホッピング数値解析法を提案し，空間電荷電界下における荷電粒子の挙動について物性的立場および工学的立場から総合的に研究を行なったものである。本章では，これらの研究に先だち1-

2で誘電体の空間電荷特性について簡単に触れ，1－3で研究の目的と概要を述べて本論文の位置付けを行なう。

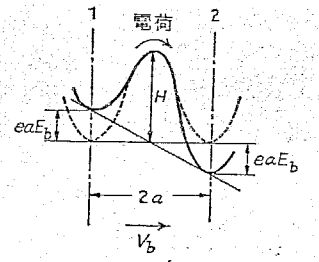
1－2 誘電体の空間電荷特性とその扱い[9]～[14]

誘電体が絶縁材料として用いられる場合，荷電粒子の挙動はその電気的特性に大きな影響を与える。そして，荷電粒子の種類によってもその性質は異なっている。特に荷電粒子が絶縁体中に空間電荷電界を形成する場合は，例えば破壊電圧の低下にみられるように工学的に重大な結果がもたらされる。そのために絶縁体中の荷電粒子を識別し，その挙動についての知見を得ることは重要で，それが空間電荷電界の形成に関与する場合はなおさらである。[9]このような電荷の挙動は，印加電界により試料内で微視的な変位をするか，あるいは巨視的に移動するかの二通りに分類される。

前者に属するものは双極子分極に代表されるもので，第1－1図のモデルで示されるように，極く限られた範囲内にある2つのポテンシャル井戸1，2の間のみで電荷が微視的に変位するものである。すなわち，電界E_bにより2つの井戸間のポテンシャルが同図（b）のように$\pm eaE_b$だけ変化するため，各井戸での粒子の占有確率が変えられることで電荷が変位するものである。そして，これらは電荷の変位が微視的で，しかも試料内全体に一様であるために空間電荷電界の形成を伴なわないことにより特徴づけられる。また，隣接したトラップによって生じるポテンシャル井戸間を電子が遷移する場合のtwo-site hoppingの機構もこのタイプに属するものである。[10]以上のように，前者の



（a）

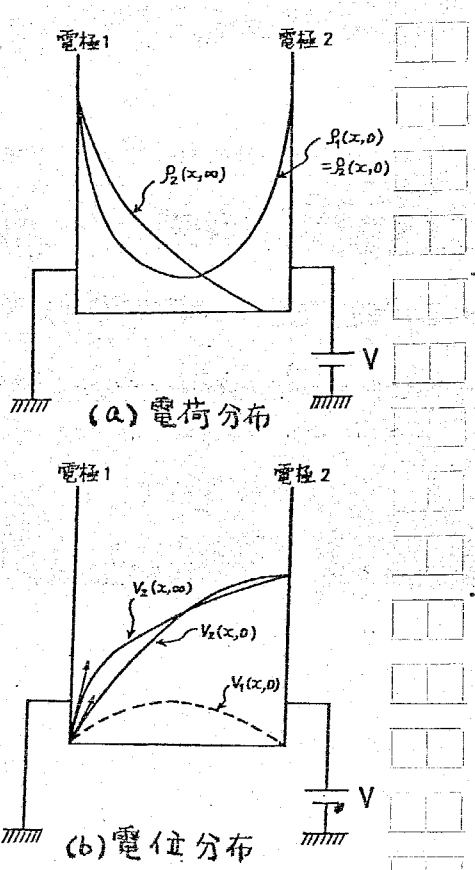


（b）

第1－1図 双極子分極における電荷の挙動

特徴は試料全体の特性が第1－1図に示される微視的な電荷の挙動より定まる点にある。従って，このような機構を扱かうことは比較的容易である。勿論，電荷の挙動が2つのポテンシャル井戸間で記述されるような単純な単一緩和過程でなく，種々の緩和時間を持つ双極子からなる分布緩和時間系となる場合が一般の絶縁材料においてはしばしば見られる。しかし，そのような場合も空間電荷電界の形成はなく，緩和現象に与かる個々の双極子の間には相互作用はないとみられ，実質的には単一緩和時間系の重ね合わせとして扱かうことができる。(11)

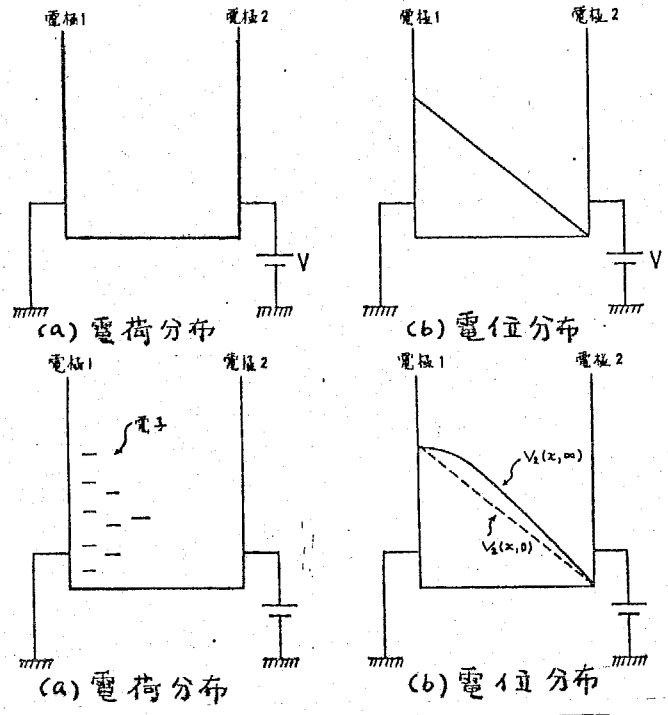
後者に属するものは，イオン空間電荷分極と電子（正孔）の注入トラップによるものが代表的である。これらは前者とは対照的に試料内に空間電荷電界を形成し，荷電粒子の巨視的な移動に伴なって空間電荷電界が変歪することに特徴がある。試料内に単一の過剰な正の可動イオン（負でも同様）がある場合のイオン空間電荷分極を第1－2図に示す。(12) 同図（a）は試料内の電荷分布で，$\rho_1(x,0)$は印加電圧が零の初期状態，$\rho_2(x,0)$は電極1に対して電極2に直流電圧Vを印加した直後の状態，そして$\rho_2(x,\infty)$は長時間経過後の平衡状態を示している。同図（b）は，同図（a）の各分布に対応する試料内の電位分布を示している。すなわち，$V_1(x,0)$，$V_2(x,0)$，$V_2(x,\infty)$は$\rho_1(x,0)$，$\rho_2(x,0)$，$\rho_2(x,\infty)$に対するものである。以上のように，イオン空間電荷分極は空間的な可動イオンの移動を伴ない試料を均一とする微視的な扱かいはできない。そして，巨視的



第1－2図　イオン空間電荷分極における電荷の挙動

なキャリアの移動を支配する拡散と空間電荷電界下でのドリフトからなる電導現象として解析しなければならない。

次に，試料内に電子（正孔の場合も同様）が注入されてトラップされる場合を考える。第1－3図（a）は電圧Vを印加した直後の試料内に電子の注入が起こる以前の電荷分布並びに電位分布である。同図（b）は，試料内に電極面1より電子の注入が起きてトラップされたときの電荷分布並びに電位分布である。同図より，注入電極面（電極1）付近で電界緩和が起きていることがわかる。このように，トラップ電荷も空間電荷電界の形成に関与することは明らかである。しかし，試料内でどのように電荷がトラップされ，従ってどのように電界が変歪されるかという物性的にも工学的にも興味ある問題を扱かうためには，電極面より注入される電子の絶縁体中での電導現象として考えなければならない。そのためには，この現象もキャリアの移動を伴なうものであるから，拡散と空間電荷電界下でのドリフトで支配されるとして解析する必要がある。



第1－3図　電子注入トラップの挙動

以上，荷電粒子の巨視的な移動に伴なう空間電荷電界の形成が関与する二つの場合を見てきたが，いずれも拡散と空間電荷電界下でのドリフトで支配される電導現象と言えよう。また，界面分極として知られている電子やイオンによる現象も後者に属するものである。[13] ただし，これは異種誘電体の境界面に電荷が蓄積される現象として理解されているが，空間電荷という立場からすれば注意しなければならない。すなわち，この現象も電荷の実質的な移動を伴なうも

のであるから，この電導も拡散と空間電荷電界下でのドリフトで支配されると言うことである。

絶縁体中の荷電粒子の挙動をみてきたが，それがキャリアの移動を伴なって空間電荷電界を形成する場合には，拡散とドリフトで支配される電導現象として捉えることが基本である。結局，この電導現象を扱かえるようにすることが空間電荷特性というものを総合的に理解し，応用するための手掛りとなる。尚，第1－1表には，今迄に述べてきた事柄を絶縁体中における荷電粒子の挙動と空間電荷電界の形成という立場から整理した。

荷電粒子		荷電粒子の挙動		空間電荷電界の形成	
		巨視的	微視的	あり	なし
双極子	双極子分極		○		○
電子（正孔）	注入トラップ	○		○	
	界面分極	○		○	
	two site hopping		○		○
イオン（正負）	イオン空間電荷分極	○		○	
	界面分極	○		○	

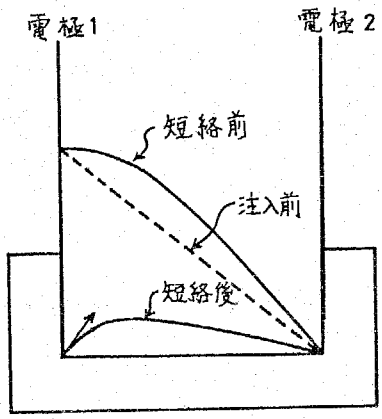
第1－1表　絶縁体中の荷電粒子の挙動と空間電荷電界の形成

空間電荷電界の形成はキャリアの電導現象と密接に関係するが，工学的にどのような意味があるかを「絶縁破壊」と言う立場から定性的に簡単に述べる。[13]

最初に，イオン空間電荷分極について第1－2（b）図を用いて考える。電極面1付近における電界（図中の矢印）は，印加電界により$V_2(x, 0)$，$V_2(x, \infty)$の場合を比較すれば明らかなように試料内のイオンの移動に伴なって高められる。このことは，絶縁破壊という観点からは，経時過程で試料内の一部の電界が高められることに注意しなければならないことを意味していると言えるであろう。

次に注入トラップについて第1－3図（b）を用いて考える。電極1からの電子の注入に伴なって，電極界面付近の電界は緩和される。一方，対向電極面においては電界が高められるが，通常注入トラップは電極1付近に集中すると考えられるので，これによって絶縁破壊が引き起こされるまでには到らないであろう。ところで第1－4図のように試料が短絡された場合には，注入電極側で極めて電界が高くなる。従って，注入連性が強くなると考えられる。(14)

以上のように空間電荷電界の形成は，「絶縁破壊」と言う工学的に重要な問題と関連している。しかし，破壊の形態は全く異なった結果が予想され，キャリアの識別が大切であることを示している。けれども，いずれの場合も前述したようにキャリアの電導を支配する現象を取扱うことが，諸特性を定量的にかつ分析的に把握する上で基本的なことである。ここに掲げた例は空間電荷電界に関する一例であるが，これ以外にも多くの特殊な現象がみられている。それらは次章以降で次第に明らかにされるであろう。



第1－4図　試料短絡による電位の変化

1－3　本研究の目的と概要

前節で述べたように，絶縁体中の荷電粒子の挙動は材料の電気的特性と密接に関係している。そして，空間電荷電界が形成される場合には，特性は試料全体から定まるため，各種の特異な現象を含んでいる。空間電荷特性を把握するための基本的なことは，これは試料内でのキャリアの移動によって定まるものであるから，拡散と空間電荷電界下でのドリフトによって支配される電導現象として扱かうことである。従来より，この種の現象はポアソンの式で空間電荷

電界の効果を考慮し，拡散とドリフト電流からなる電流連続の式を解析的に取扱うという立場から研究が進められてきている。けれども，このような扱かいをすることは一般的に困難である。そのため，最近では電算機の進展に伴なって，記述された微分方程式を差分式で近似し，得られる方程式を数値解析する方法が用いられるようになってきた。しかしその場合，境界条件の複雑さや差分式の作り方など各種の問題があり，空間電荷特性を総合的に研究するためには困難な面が多い。

本研究の目的は，従来よりイオン伝導の説明に用いられてきたイオンホッピングの取扱いを基礎として，これを試料全体に拡張したモデルによって上記の電導現象を数値解析する新しい方法を提案し，空間電荷特性について物性的立場および工学的応用の立場から総合的に検討することである。

本研究の概要を第1－2表を用いて述べる。本研究は，拡散とドリフトからなる電流の式を扱かうことから出発している。そして，ホッピング数値計算法の前段階として今迄の研究の流れより，イオン空間電荷分極の定常解析が行なわれた。けれども，この取扱いが定常解析以上の進展が望めないことから，ホッピングモデルを用いた数値計算法の提案を行なって同上の解析を試みた。以下はこれを基礎として各種の空間電荷分極に関する解析および応用を行なったが，それらは表に示したように互に関連している。表中○印で記したものはその研究が一応終了したことを意味し，△印は継続中であることを示している。何も記してない事項はこれからの課題と考えているものである。

本研究は電導現象の扱いが出発点であり，電気・電子工学上の多くの問題はこれによって取扱かわれるであろうから，その広がりは大きく，表に記した以外の多くの進展が予想される。そして，本研究はこれらの基礎となる部分を総合的に扱かったものである。以上の観点から，本論文では表に記された研究の流れと今後の展望も考慮し，次の4ブロックによってその構成がされている。

Ⅰ．イオンホッピングモデルによるホッピング数値計算法の提案と，同方法を用いてのイオン定常，過渡現象の問題に関する部分：第2章～第5章

II. 電子伝導現象に対するホッピング数値計算法の適用を試みた部分：第6章～第8章

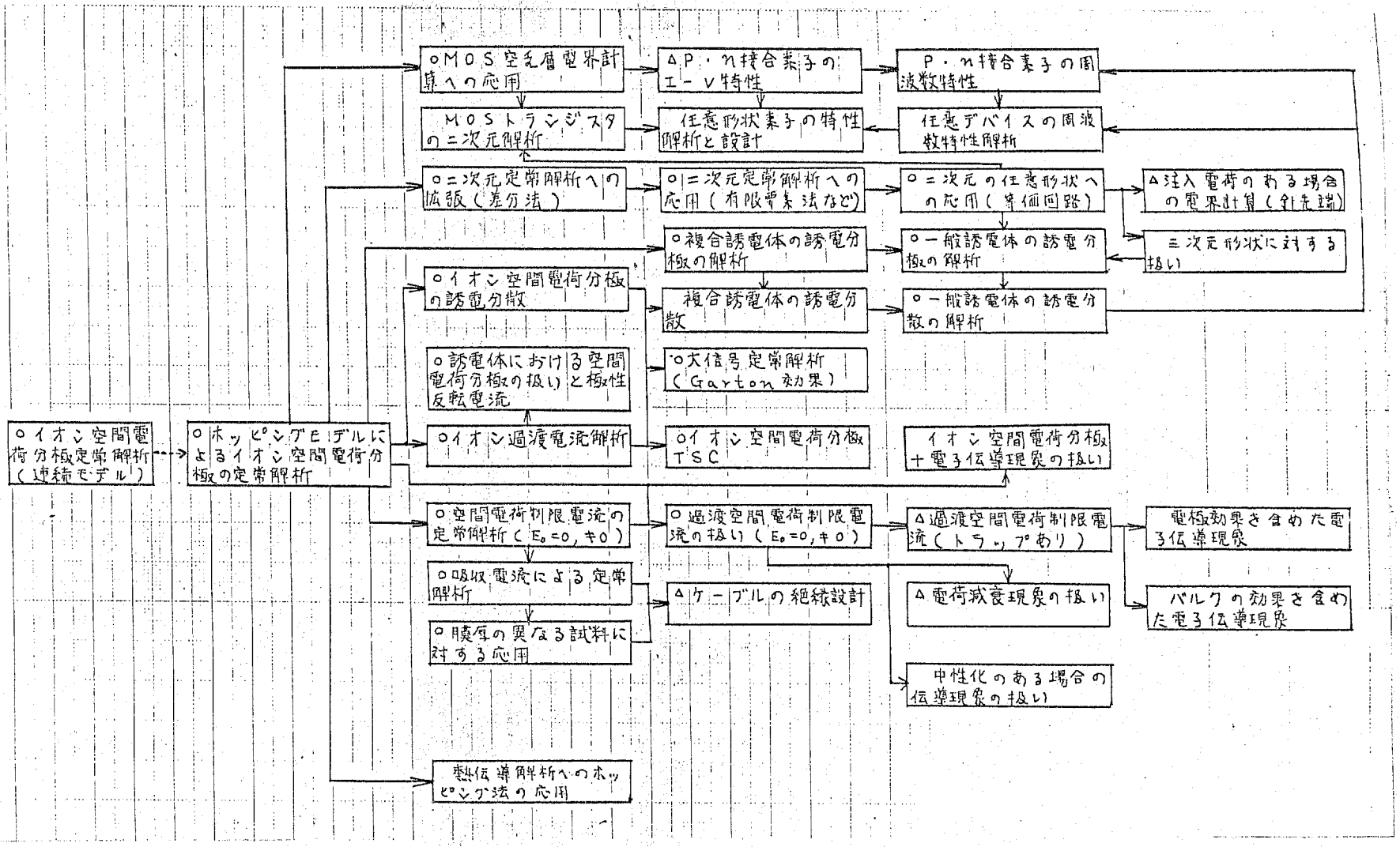
III. 空間電荷分極の誘電特性の解析にホッピング数値計算法の適用を試みた部分：第9章～第11章

IV. ホッピング数値計算法を応用した部分：第12章～第14章

そして，上記の研究に加え，独立に「MIS構造素子の界面準位の測定法」に関する研究が第15章で述べられている。

1－4. まとめ

本章では，拡散とドリフトからなる電導現象を扱うことが空間電荷特性についての物性的および工学的な両立場より研究を進めるために必要であることを述べた。そして，1－2で絶縁体において空間電荷がどのように関与しているかを示し，工学的にはどのような問題を含むかについて簡単に触れ，本研究の導入を行なった。1－3では本研究の流れを表で示し，論文の構成を説明した。


○イオン空間電荷分極定常解析（連続モデル）
○ホッピングモデルによるイオン空間電荷分極の定常解析
○MOS空乏層電界計算への応用
△P・n接合素子のI－V特性
P・n接合素子の周波数特性
MOSトランジスタの二次元解析
任意形状素子の特性解析と設計
任意デバイスの周波数特性解析
○二次元定常解析への拡張（差分法）
○二次元定常解析への応用（有限要素法など）
○二次元の任意形状への応用（等価回路）
△注入電荷のある場合の電界計算（針先端）
三次元形状に対する扱い
○複合誘電体の誘電分極の解析
○一般誘電体の誘電分極の解析
○イオン空間電荷分極の誘電分散
複合誘電体の誘電分散
○一般誘電体の誘電分散の解析
○誘電体における空間電荷分極の扱いと極性反転電流
○大信号定常解析（Garton効果）
○イオン過渡電流解析
○イオン空間電荷分極TSC
イオン空間電荷分極＋電子伝導現象の扱い
○空間電荷制限電流の定常解析（E₀=0, κ0）
○過渡空間電荷制限電流の扱い（E₀=0, κ0）
△過渡空間電荷制限電流（トラップあり）
電極効果を含めた電子伝導現象
○吸収電流による定常解析
△ケーブルの絶縁設計
△電荷減衰現象の扱い
バルクの効果を含めた電子伝導現象
○膜厚の異なる試料に対する応用
中性化のある場合の伝導現象の扱い
熱伝導解析へのホッピング法の応用

第1-2表　本研究の流れ

第2章　ホッピング数値計算法による誘電体中の空間電荷特性の解析法に関する研究

2-1　まえがき[15]〜[21]

本章では，イオンホッピングモデルを基礎としてホッピング数値計算法の導入を行なう。

絶縁体中の可動イオンによる空間電荷分極（電極分極）については，イオンの拡散とドリフトを考慮し，ポアソンの式で与えられる，いわゆる空間電荷電界を取入れて絶縁体内部での諸量を連続的に扱かって，現象を記述する微分方程式を解くことにより解析されている。[15][16] この解析では定常状態に達したときの分極やイオン濃度が定められるが，分極の形成される途上の過渡現象，つまりイオンの過渡電流や電荷分布の時間変化を解析することは非常に困難である。しかし絶縁物のなかには可動イオンを含むものも多く，これらの分極を取扱う場合には拡散と空間電荷の効果を考慮しなければならないが，このことによって各種の特殊な現象も理解できると考えられる。また，イオン空間電荷分極に限らず，電子などのキャリアによる空間電荷分極も拡散と空間電荷電界下でのドリフトからなる微分方程式で記述される。この場合，電荷の電極面からの注入も考えられ，境界条件はイオン空間電荷分極における電極面の電荷に対するブロッキングの条件と異なって扱いは一層難かしい。そのために過渡解析だけでなく定常解析を行なうことも困難である。

従来，この種の現象を拡散定数と移動度を用いて記述される微分方程式で取扱う場合には，境界条件による式の複雑化や拡散と空間電荷電界を共に考慮することの困難性から，拡散あるいは空間電荷を無視したり境界条件を簡略化するなどされている。例えば，E. H. Snow氏らによるイオン過渡電流解析では拡散の効果が無視されている。[8] また，絶縁体の電子（正孔）伝導現象としてよく知られている空間電荷制限電流（SCLC）の定常解析や過渡解析でも，拡散の効果を無視して研究が進められている。[17] しかしながらこれらの方程式の

簡略化や一部の効果の無視が電導特性の解析に重要な影響を与える場合もあろうから，それらの近似をすることなく解析することが誘電体電導現象の特殊な現象を理解する上で重要である。

このような観点から，最近では電子計算機の発達に伴ない，記述される微分方程式の一部の効果を無視することなく数値解析によってそのまま取扱おうとする試みがなされるようになってきた。すなわち，微分方程式を差分方程式で置き換えて解析するという方法である。D. Kahn氏らやD. R. France-Shetich氏らは，イオン伝導にステップ状の電圧を印加した場合をこの方法により初期過渡電流特性の解析を試みている。[18],[19] また，最近では電子デバイスの解析にこの方法を取入れた報告もいくつかみられる。[20] しかしながら，いずれも微分方程式を基礎として差分近似式を導いて解析する方法であるために，座標系によって微分方程式が変化するのに呼応して導かれる差分方程式も変化する。また，差分近似式の作り方によっても方程式系が変化し，これらの扱かいが計算の成否に影響するなど数値解析上の問題も多く含まれている。さらに，境界条件の処理が難かしいのもこの方法の欠点である。[21]

本論文では，上記の拡散と空間電荷電界のもとでのドリフトによる電導現象に対する新しい解析法としてホッピング数値計算法を提案する。そして，この方法を用いて各種電導現象の解析とその応用を試みている。本章では，この方法の基本的な考え方や有効性を述べる。加えて，この考え方が電導現象に限らず広範囲に応用できるものであることも述べる。

2-2. 一次元ホッピングモデル[22]~[25]

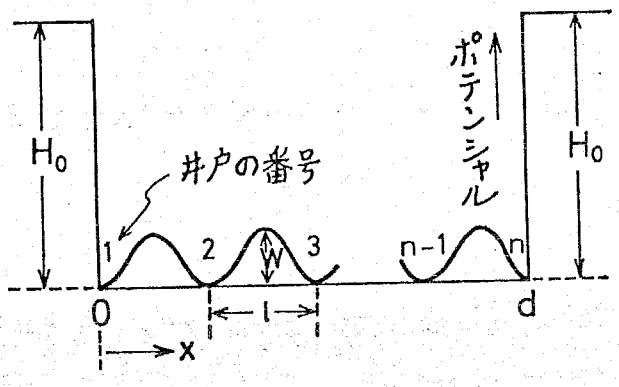
ホッピング数値計算法は，イオンホッピングモデルを基礎としている。そこで，この節ではイオン伝導現象に対する扱いからこの解析法の基本的な考え方を説明する。

イオン空間電荷分極の形成は試料内での可動イオンの巨視的な移動，つまりイオン伝導によって行なわれるものであるから，従来からイオン伝導の説明に

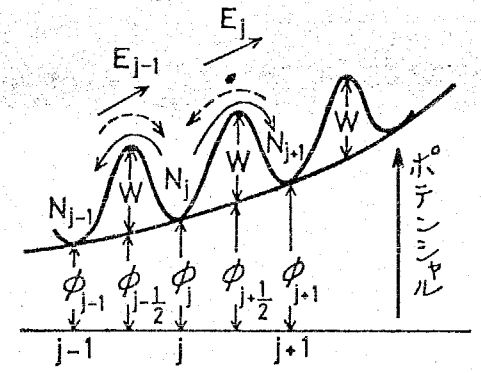
用いられているポテンシャル井戸の間を遷移してイオンがホッピングする取扱いを基礎とし，これを電極間の試料全体に拡張したモデルで解析することを考える。[22] このモデルは個々の井戸におけるイオン粒子の挙動を追うために電算機による数値計算をすることになるが，拡散定数や移動度を特に定めなくても，これらの効果が自然に導入されて空間電荷電界も考慮して過渡状態の解析が容易になってくる。更に，電流が電界に対して双曲線関数的に変化する事実を，そのまま取入れており，移動度と拡散定数を用いる従来の解析よりむしろ適切と考えられる。このような有限個のポテンシャルを考えた研究としては，高分子の鎖に沿ってポテンシャルを設定し，分子鎖内でイオンが遷移するとして材料の大きな誘電率を説明しようとする試みがあり興味深いが，その場合は空間電荷電界を導入することなく本研究とは立場が異なるものである。[23]~[25]

次に，本論文で取扱うホッピングモデルを具体的に第2－1図を用いて説明する。

厚さdなる試料内に高さWのポテンシャルがあり，このポテンシャルの井戸の間隔はすべて同じでlとする。イオンは試料内から出ることができないとし，試料面のポテンシャルH_0を極めて大きいとする。試料内には過剰の正イオンが存在し（負イオンでも同じ），これによって空間電荷電界が形成されるとする。次に従来イオン伝導で考えているように相隣るポテンシャル井戸の間でイオンが遷移によって移動するが，井戸に存在するイオン粒子を考えるので，遷移過程の中にドリフトに相当する効果と拡散に相当



第2－1図　ホッピングモデル



第2－2図　ホッピングモデルの詳細な説明図

する効果が入ってくる。このようなモデルについて試料中の一部を図示すれば第2-2図のように表わされるであろう。ここで，ϕ_j，$\phi_{j+\frac{1}{2}}$はそれぞれ試料の端の$x=0$から測ったj番目の井戸の電位，およびj番目とj+1番目の井戸の間にあるポテンシャル障壁の下端の電位である。また，N_jはj番目の井戸に存在するイオンの数である。

さて，このようなホッピングモデルの利点は，従来のドリフトと拡散による取扱い（以後，これを連続モデルと言う）と比べて次のような点にあると考えられる。まず連続モデルではドリフト電流は電界に比例するとしているが，イオン伝導は古くから考えているように電界に対して双曲線的に変化するもので，電界が小さいときのみ電界に比例する近似がとられる。空間電荷分極のようにかなり大きな電界が形成されると考えられる場合には上記の近似は成立しなくなるが，ホッピングモデルではイオン伝導の考え方をそのまま取入れているので，低電界から高電界まで適用できるものである。次に，連続モデルでは過渡現象を取扱う場合，電流連続を表わす関係式はイオン濃度に対して記述すれば二階の非線型微分方程式で，更に境界条件も考慮すれば解析は非常に複雑で困難である。また，2-1「まえがき」でも述べたように差分方程式で扱かうのも数値解析上の多くの問題を含み厄介である。ところがホッピングモデルによれば，記述される電流連続の式は各ポテンシャル井戸に存在するイオン粒子についての連立微分方程式となり，境界条件もこの式の中に入ることになって電算機を用いての過渡現象の取扱いは容易である。ただし解析解は得られないが，このことは連続的取扱いで定常状態の諸特性を図示する場合にも解析解が複雑なため電算機によらねばならない。更に現実の材料中にてはイオン結晶であれ非結晶であれ本論文のモデルのように単純なものではなく，例えば相隣る井戸間の距離ℓ（ホッピング距離），イオンのポテンシャルWなども一定ではなく，またホッピング方向も単に電界方向とは考えられないが，このようなモデルの単純化は材料を均質とみる場合のものであり，ℓ，Wなどはその平均的な意味を持つことになろう。そして，この単純化は連続モデルでも全く同等とみられ，

ホッピングモデルは距離lを小さくした極限において連続モデルに一致することを後に示す。またその場合に，移動度や拡散定数もホッピングモデルの定数で表示されることになる。

いま第2-2図を参照し，j番目の井戸からj+1番目の井戸あるいはj番目の井戸からj-1番目の井戸への遷移確率をそれぞれ$\omega_{j,j+1}$，$\omega_{j,j-1}$で表わすと，これらは次のように書ける。(22)

$$\left.\begin{aligned}\omega_{j,j+1} &= \nu \exp\left(-\frac{W}{kT}\right)\exp\left(-\frac{q}{kT}\left(\phi_{j+\frac{1}{2}}-\phi_j\right)\right)\\ \omega_{j,j-1} &= \nu \exp\left(-\frac{W}{kT}\right)\exp\left(-\frac{q}{kT}\left(\phi_{j-\frac{1}{2}}-\phi_j\right)\right)\end{aligned}\right\} \cdots(2-1)$$

ここで，νは周波数因子つまりイオンの井戸における振動数，qはイオンの電荷，Kはボルツマン定数，Tは絶対温度である。一方，各井戸におけるイオン数の時間的変化は，第2-2図からわかるように相隣る井戸間のイオンの遷移に関係し，j番目の井戸におけるイオン数をN_jとして次式で示される。

$$dN_j/dt = \omega_{j-1,j}N_{j-1} - (\omega_{j,j-1}+\omega_{j,j+1})N_j + \omega_{j+1,j}N_{j+1} \quad (j=1,2,\cdots,n) \cdots(2-2)$$

ただし，第1番目と第n番目の井戸，すなわち電極界面ではイオンに対してブロッキングになっているから$\omega_{0,1}$，$\omega_{1,0}$，$\omega_{n,n+1}$，$\omega_{n+1,n}$はすべて零である。このように電極面がイオン粒子に対してブロッキングとなる条件は，遷移確率を零とすることにより式中に代入できる。(2-2)式に初期条件を与えれば，絶縁膜中のイオン空間電荷の形成や電界変化の程度などを計算することができる。さて，ホッピングモデルの基本となる(2-2)式と連続モデルの電流連続の式とを比較しておく。第2-2図j番目の井戸からポテンシャルの山を越えてj+1番目の井戸へ流れる正味の電流は，

$$J = \omega_{j,j+1}qN_j - \omega_{j+1,j}qN_{j+1}$$

$$= \nu \exp\left(-\frac{W}{kT}\right) \exp\left\{-\frac{q}{kT}(\phi_{j+\frac{1}{2}} - \phi_j)\right\} q N_j$$

$$- \nu \exp\left(-\frac{W}{kT}\right) \exp\left\{-\frac{q}{kT}(\phi_{j+\frac{1}{2}} - \phi_{j+1})\right\} q N_{j+1}$$

・・・・・(2-3)

いま，ポテンシャルの数nを非常に大きくして，$q(\phi_{j+\frac{1}{2}} - \phi_j)/kT$，$q(\phi_{j+\frac{1}{2}} - \phi_{j+1})/kT$ が小さくなり，指数関数の第一近似が用いられるとすると，$\phi_{j+\frac{1}{2}} - \phi_j = -(\phi_{j+\frac{1}{2}} - \phi_{j+1})$ として，

$$J = \nu \frac{q}{kT} \exp\left(-\frac{W}{kT}\right)(\phi_j - \phi_{j+1})\, q N_j$$

$$- \nu \left\{1 - \frac{q}{kT}(\phi_{j+\frac{1}{2}} - \phi_{j+1})\right\} \exp\left(-\frac{W}{kT}\right)(q N_{j+1} - q N_j)$$

$$= \nu l^2 \frac{q}{kT} \exp\left(-\frac{W}{kT}\right) \frac{-\phi_{j+1} + \phi_j}{l} \frac{q N_j}{l}$$

$$- \nu l^2 \left\{1 - \frac{q}{kT}(\phi_{j+\frac{1}{2}} - \phi_{j+1})\right\} \exp\left(-\frac{W}{kT}\right)$$

$$\cdot \left(\frac{q N_{j+1}}{l} - \frac{q N_j}{l}\right) \cdot \frac{1}{l} \qquad \cdots\cdots (2-4)$$

ここで，$l = dx$，$q N_j / l = \rho(x)$（電荷密度），$q N_{j+1} - q N_j / l = d\rho$，$-(\phi_{j+1} - \phi_j)/l = E(x)$（電界），$q(\phi_{j+\frac{1}{2}} - \phi_{j+1})/KT \ll 1$ とみられるので，上式は次のように表示できる。

$$J = \nu l^2 \frac{q}{kT} \exp\left(-\frac{W}{kT}\right) E\rho - \nu l^2 \exp\left(-\frac{W}{kT}\right) \frac{d\rho}{dx}$$

ここで，移動度μと拡散定数Dさ　　・・・・・(2-5)

$$\mu = \nu l^2 \frac{q}{kT} \exp\left(-\frac{W}{kT}\right), \quad D = \nu l^2 \exp\left(-\frac{W}{kT}\right)$$

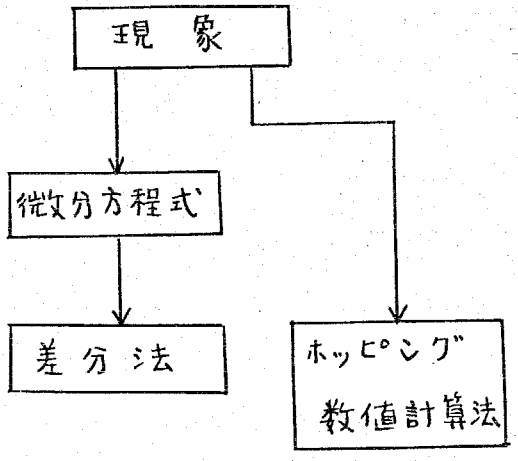
・・・・・(2-6)

とみるならば，（3－5）式は

$$J = \mu E \rho - D \cdot d\rho/dx \quad \cdots\cdots (2-7)$$

となり，連続モデルの電流の基本式と一致することになる。また，μとDの間のアインシュタインの関係の成立も明らかである。すなわち，ホッピングモデルはその特別の場合として連続モデルを含んでいることになる。更にこの関係は，定常状態のみならず過渡状態に対しても同様に成立することも明らかである。

以上述べたように，一次元ホッピングモデルを用いれば空間電荷電界によるドリフトと拡散からなる電導現象が取扱えることがわかる。ただし，以下の点に留意しておくことは重要である。すなわち，（2－2）式の基本式は現象より直接導かれた方程式であって，差分法のように現象を記述する微分方程式を変形して得られたものでないということである。第2－3図に，これらの関係を模式化して示したが，現象より直接に基本方程式を組み立てて解析する方法を，それがイオン伝導現象におけるホッピング伝導を基礎としているので，「ホッピング数値計算法」と呼ぶことにする。そして，ホッピング数値計算法は第3－3図に示すように微分方程式を差分する方法とは明らかに立場が異なるものである。この立場の相異から，導かれる方程式も構造的に違ったものとなることが予想されようが，これらに関しては本章および付録1で追って述べることにする。さらに付録2では，本数値計算法を差分法よりみた場合について計算精度とのかね合いから述べた。



第2－3図　電導現象に対する取扱いの比較

2－3．一次元ホッピングモデルの拡張

前節では，ホッピングモデルより電導を扱かう基本方程式として（2－2）

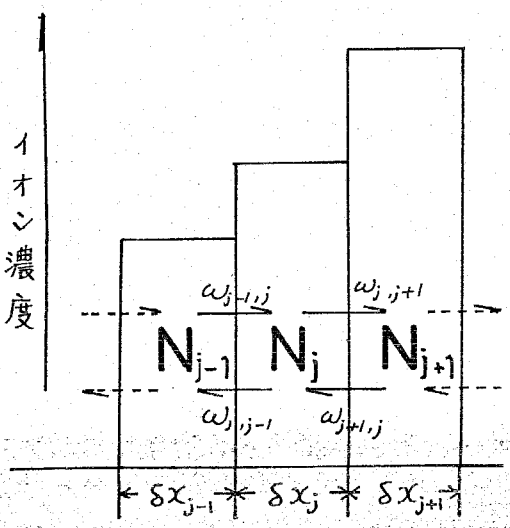
式を導いた。本節では，(2-2)式を再考して一次元モデルの拡張をする。

(2-2)式は，イオン数 N_j を $\delta N_j = \delta x_j \cdot \bar{\rho}_j$ と置くと，

$$\frac{d}{dt}(\delta x_j \cdot \bar{\rho}_j) = \omega_{j-1,j} \cdot (\delta x_{j-1} \cdot \bar{\rho}_{j-1}) - (\omega_{j,j-1} + \omega_{j,j+1}) \cdot (\delta x_j \cdot \bar{\rho}_j) + \omega_{j+1,j} \cdot (\delta x_{j+1} \cdot \bar{\rho}_{j+1}) \quad (j = 1, 2, \cdots, n) \quad \cdots\cdots (2-8)$$

となる。ただし，δx_j は $j - \frac{1}{2}$ と $j + \frac{1}{2}$ の区間の距離，$\bar{\rho}_j$ はその区間のイオンの平均濃度である。

上式のように(2-2)式を書き換えた場合，図形的には第2-2図を第2-4図のように示されることを意味している。すなわち，δx_j の区間に含まれる電荷は，隣接する区間 δx_{j-1}，δx_{j+1} 内に含まれる電荷と電荷の交換を行ない，その場合，遷移を表わす因子 $\omega_{j,j+1}$，・・・によって結ばれるという意味である。そして，これが区間 δx_j の区切り方によらないことも明らかである。また，$\omega_{j,j+1}$ は必ずしもイオンホッピングを表わすものでないことも容易に推測できよう。この考え方は電子伝導に対する扱かいにおいて重要となるが，後の章で述べることにする。



第2-4図 一次元ホッピングモデルの拡張

以上のように考えると，一次元におけるホッピング数値計算法における基本方程式の作成は次のような順序で整理される。

(i) 試料内を δx_j の区間により分割する。ただし，区間内の任意の2点の濃度 ρ_j，ρ_j' を考えると，$|\rho_j - \rho_j'| < \varepsilon$，$\varepsilon$ は小さな数 とする仮定が成立するような分割とする。この場合，$\delta x_j = l$ (＝イオンホッピング距離)

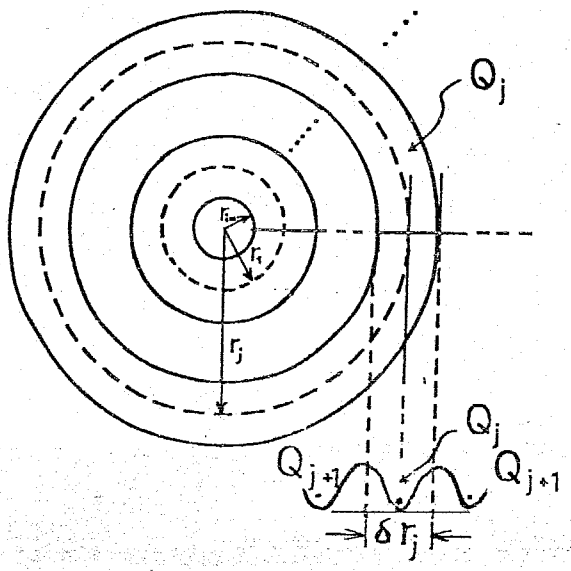
とすれば，実際のイオンホッピングとしての物性的な意味を持つ。

（ii）各区間を遷移を表わす因子（$\omega_{j,j+1}$，$\omega_{j+1,j}$，・・）で結ぶことにより基本方程式を作成する。

（iii）基本方程式に境界条件を代入する。

ここでは（iii）項については触れないが，後に説明を行なう。

上記のように考えるならば，例えばケーブルのように回転軸対称で表わされる場合における絶縁体中の電導現象を記述する基本式は以下のように作成される。まず，（i）の仮定のもとで同心円状に領域を分割する。この分割は試料の形状から考えて妥当であろう。従って，（ii）の項目における j 番目の領域内の電荷 Q_j に対する基本方程式は，$\omega_{j,j+1}$ を j 番目の領域から j＋1番目の領域への遷移確率を表わす因子として，次のように一次元に還元されて示される。



第2－5図　回転軸対称の試料に対する領域の分割

$$\frac{dQ_j}{dt} = \omega_{j+1,j} Q_{j-1} - (\omega_{j,j-1} + \omega_{j,j+1}) Q_j + \omega_{j+1,j} Q_{j+1} \quad \cdots\cdots (2-9)$$

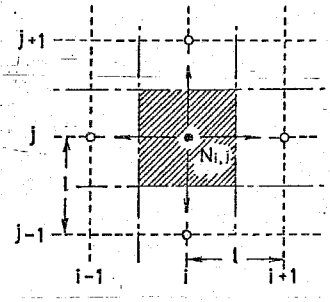
ただし，Q_j はこの領域での粒子の平均濃度を $\bar{r}_j$ として $Q_j = 2\pi r_j \delta r_j \cdot \bar{r}_j$ となる。そして，（2－9）式には前節で述べたように空間電荷電界のもとでのドリフトと拡散の効果が入っていることも明らかである。

以上で一次元ホッピング数値計算法における基本方程式の作成についての説明を終わるが，（2－2），（2－9）式が形式上全く同じであることに対しては注意が必要である。

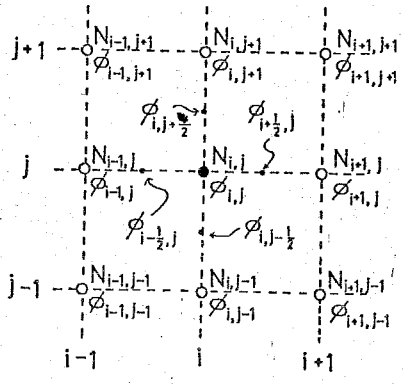
2－4．二次元ホッピングモデル

前節までで一次元ホッピング数値計算法の概略の説明を終わるが，本節では二次元に対する扱いを示す。二次元ホッピング数値計算法の必要性は，最近，絶縁体の各種の問題に関連して空間電荷分極の影響が注目されているが，二次元，三次元の取扱いをしなければならない問題があることによる。例えばプラスチックケーブルにおけるトリーの問題とか，電気機器やデバイスにおける形状を考慮した絶縁設計や特性の評価などがこれにあたる。[26] そこで，一次元ホッピングモデルを拡張することにより以下に二次元ホッピングモデルを説明しよう。

二次元の場合には，一次元と異なりイオン粒子の遷移はあらゆる方向に対して考えられる。これは第2－6図，(i, j)点におけるポテンシャル井戸に存在するイオン粒子が，ホッピング距離ℓを隔てたあらゆる方向の点に遷移することを考慮する必要があることを意味する。そのためには(i, j)点のイオン粒子が，$(i+1, j)$，$(i, j+1)$，$(i-1, j)$，$(i, j-1)$の各点のポテンシャル井戸へのみ遷移するとし，順次この遷移が続くとすればよい。すなわち，可動イオンの遷移は隣接する四つのポテンシャル井戸に対してのみであると考えればよい。したがって，(i, j)点に存在する$N_{i,j}$個のイオン粒子の時間変化$dN_{i,j}/dt$は，第2－7図より



第2－6図　(i, j)点のイオン粒子の挙動



第2－7図　試料内の荷電粒子の位置及び電位

$$
\begin{aligned}
&dN_{i,j}/dt \\
&= \omega_{(i+1,j),(i,j)} N_{i+1,j} - \omega_{(i,j),(i+1,j)} N_{i,j} \\
&+ \omega_{(i,j+1),(i,j)} N_{i,j+1} - \omega_{(i,j),(i,j+1)} N_{i,j} \\
&+ \omega_{(i-1,j),(i,j)} N_{i-1,j} - \omega_{(i,j),(i-1,j)} N_{i,j} \\
&+ \omega_{(i,j-1),(i,j)} N_{i,j-1} - \omega_{(i,j),(i,j-1)} N_{i,j}
\end{aligned}
\quad \cdots\cdots (2-10)
$$

ただし，ωはイオンの遷移確率を表わす。その場合，添字は遷移する方向を表わし，例えば$\omega_{(i-1,j),(i,j)}$は，$(i-1, j)$から(i, j)の井戸へのイオンの遷移を意味している。そして，この確率は(2-1)式と同様に，(i, j)のポテンシャルを$\phi_{i,j}$，(i, j)と$(i-1, j)$の中間のポテンシャルを$\phi_{i-\frac{1}{2},j}$として次のようである。

$$
\omega_{(i-1,j),(i,j)} = \nu \exp\left(-\frac{W}{kT}\right) \cdot \exp\left\{-q(\phi_{i-\frac{1}{2},j} - \phi_{i-1,j})/kT\right\}
\quad \cdots\cdots (2-11)
$$

そこで，(2-10)，(2-11)式で示される二次元の基本式と電流連続の式とを比較する。2-2節で述べたように，(i, j)から$(i+1, j)$へ流れる正味の電流$J_{(i,j),(i+1,j)}$は，

$$
\begin{aligned}
J_{(i,j),(i+1,j)} &= \omega_{(i,j),(i+1,j)}\, q N_{i,j} - \omega_{(i+1,j),(i,j)}\, q N_{i+1,j} \\
&= q N_{i,j} \cdot \nu \exp\left(-\frac{W}{kT}\right) \cdot \exp\left\{-q(\phi_{i+\frac{1}{2},j} - \phi_{i,j})/kT\right\} \\
&\quad - q N_{i+1,j} \cdot \nu \exp\left(-\frac{W}{kT}\right) \cdot \exp\left\{-q(\phi_{i+\frac{1}{2},j} - \phi_{i+1,j})/kT\right\}
\end{aligned}
\quad \cdots\cdots (2-12)
$$

いま，ポテンシャルの数を大きくして，$q(\phi_{i+\frac{1}{2},j} - \phi_{i,j})/kT$，$q(\phi_{i+\frac{1}{2},j} - \phi_{i+1,j})/kT$が小さくなり，指数関数の第1近似が用いられるとすると，

$J_{(i-1,j),(i,j)}$

$$= \frac{q}{kT}\nu l^2 \exp\left(-\frac{W}{kT}\right)\frac{-\phi_{i+1,j}+\phi_{i,j}}{l}\cdot\frac{qN_{i,j}}{l}$$

$$-\nu l^2 \exp\left(-\frac{W}{kT}\right)\left\{1-\frac{q}{kT}\left(\phi_{i+\frac{1}{2},j}-\phi_{i+1,j}\right)\right\}\cdot\left(\frac{qN_{i+1,j}}{l}-\frac{qN_{i,j}}{l}\right)\frac{1}{l}$$

・・・・・(2-13)

ここで，$l=dx=dy$，$qN_{i,j}/l^2=\rho(x,y)$，$q(N_{i+1,j}-N_{i,j})/l^2=d\rho$，$-(\phi_{i+1,j}-\phi_{i,j})/l=E_x$（電界），$q(\phi_{i+\frac{1}{2},j}-\phi_{i+1,j})/kT \ll 1$とみられる。さらに移動度$\mu$と拡散定数Dを，$\mu=q\nu l^2\exp(-W/kT)/kT$，$D=\nu l^2\exp(-W/kT)$とみるならば，$J_{(i,j),(i+1,j)}/l$はx方向の電流密度$J_x$を表わしていると考えられるので，(2-13)式は，

$$J_x=\mu E_x \rho - D\frac{d\rho}{dx} \qquad \cdots\cdots(2-14)$$

となり，連続モデルの電流の基本式と一致する。同様にして(i,j)から$(i-1,j)$のy方向に流れる電流$J_{(i,j),(i-1,j)}$などを求めて(2-10)式を整理すれば，

$$\frac{d}{dt}\frac{qN_{i,j}}{l^2}=\frac{1}{l^2}\left(J_{(i-1,j),(i,j)}-J_{(i,j),(i+1,j)}\right)$$

$$+\frac{1}{l^2}\left(J_{(i,j-1),(i,j)}-J_{(i,j),(i+1,j)}\right)$$

・・・・・(2-15)

従って，(2-15)式は，(2-14)式を導いた場合と同様に，

$$\frac{d}{dt}\rho(x,y)=-\left(\frac{\partial}{\partial x}J_x+\frac{\partial}{\partial y}J_y\right)=-\nabla J$$

・・・・・(2-16)

となり，$l\to 0$の極限で電流連続の式と一致していることがわかる。また，(2-14)式からは，この電流に拡散とドリフト電流が含まれていることも明

らかである。以上のように，二次元に対しても一次元同様，（2－10）式で記述される基本方程式により拡散と空間電荷電界を考慮した解析が行なえることが明らかとなった。さて，上式の解析過程で，l が実際のイオン結晶におけるホッピング距離と等しい場合には，（2－10）式には物性的な意味も含まれていることは明らかである。

2－5．二次元ホッピングモデルの拡張

本節では，2－4節と同様に，（2－10）式の基本式の考え方を拡張する。

電荷数 $N_{i,j}$ を $\delta N_{i,j} = \bar{\rho}_{i,j} \cdot \delta x_i \, \delta y_j$ と置き，（2－10）式を書き直せば，

$$\begin{aligned}
&\frac{d}{dt} \bar{\rho}_{i,j} \cdot \delta x_i \cdot \delta y_j \\
&= \omega_{(i+1,j),(i,j)} \, \bar{\rho}_{i+1,j} \, \delta x_{i+1} \cdot \delta y_j - \omega_{(i,j),(i+1,j)} \, \bar{\rho}_{i,j} \, \delta x_i \cdot \delta y_j \\
&+ \omega_{(i,j+1),(i,j)} \, \bar{\rho}_{i,j+1} \, \delta x_i \cdot \delta y_{j+1} - \omega_{(i,j),(i,j+1)} \, \bar{\rho}_{i,j} \, \delta x_i \cdot \delta y_j \\
&+ \omega_{(i-1,j),(i,j)} \, \bar{\rho}_{i-1,j} \, \delta x_{i-1} \cdot \delta y_j - \omega_{(i,j),(i-1,j)} \, \bar{\rho}_{i,j} \, \delta x_i \cdot \delta y_j \\
&+ \omega_{(i,j-1),(i,j)} \, \bar{\rho}_{i,j-1} \, \delta x_i \cdot \delta y_{j-1} - \omega_{(i,j),(i,j-1)} \, \bar{\rho}_{i,j} \, \delta x_i \cdot \delta y_j
\end{aligned} \quad \cdots\cdots (2-17)$$

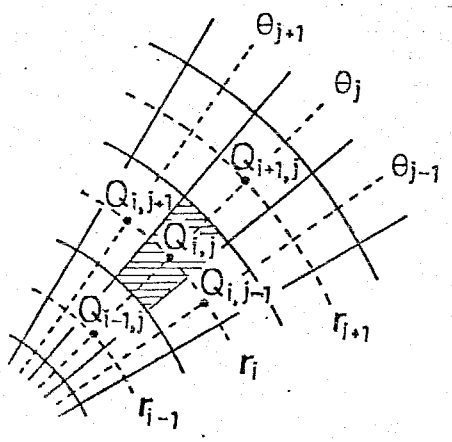
ただし，$\bar{\rho}_{i,j}$ は (i, j) を囲む第2－6図斜線部分の電荷数の平均濃度，$\delta x_i \cdot \delta y_j$ は斜線部分の領域の面積である。

（2－17）式を用いて空間電荷分極を解析する意味を第2－6図で説明すれば次のようになる。まず，一点鎖線で囲まれた領域（この場合は正方形状）内の電荷密度 $\bar{\rho}_{i,j}$ を一定とするが，解析する場合には領域内の電荷はすべて内部のポテンシャル井戸にあると考える。（図中の斜線部の領域の電荷が，中心のポテンシャル井戸 (i, j) に $\delta N_{i,j} = \bar{\rho}_{i,j} \, \delta x_i \cdot \delta y_j$ としてすべてあるとする。）そして，それらの電荷は隣接する領域内のポテンシャル井戸に（2－11）式で記述される遷移確率で移動するとして近似的に解析するということである。すなわち，電荷の挙動という現象より直接に導かれる式により解析するという意味である。そして，導かれる式は極限で（2－16）式と一致して

おり，結果的にはこの式を近似的に扱っていることになる。このように，（2－17）式は直接（2－16）式を近似して得られたものでなく，その意味で（2－16）式の差分近似式とは異なることは2－2節で述べた通りである。

以上のように（2－16）式を用いた解析が行なえることが明らかとなった。ところで，一次元の解析の場合には区分の仕方によらないこと述べた。二次元の場合にも，$\rho(x, y)$ を電荷密度とし，一つの領域内の任意の2点 (x, y)，(x', y') を選んだ場合，$|\rho(x, y) - \rho(x', y')| < \varepsilon$，$\varepsilon$ は非常に小さな正の数として領域を分割すれば第2－6図のように正方形状でなくてもよいと考えられる。そして，その場合の基本式の作成法も2－3項で述べた通りとなる。例として円筒形状の試料に対する扱かいを考えてみよう。第2－8図は円筒形状の試料の一部を円筒座標系により領域を分割した様子を示している。ここで領域の分け方としては円筒座標系を用いたが，このような形状の試料に対しては通常よく行なわれるもので妥当であろう。2－3節で述べた手順に従って領域内の電荷の運動方程式を作るが，図中斜線部分の領域内の粒子について考えれば，

$$
\begin{aligned}
&\frac{dQ_{i,j}}{dt} \\
&= \omega_{(i+1,j),(i,j)} Q_{i+1,j} - \omega_{(i,j),(i+1,j)} Q_{i,j} \\
&+ \omega_{(i,j+1),(i,j)} Q_{i,j+1} - \omega_{(i,j),(i,j+1)} Q_{i,j} \\
&+ \omega_{(i-1,j),(i,j)} Q_{i-1,j} - \omega_{(i,j),(i-1,j)} Q_{i,j} \\
&+ \omega_{(i,j-1),(i,j)} Q_{i,j-1} - \omega_{(i,j),(i,j-1)} Q_{i,j}
\end{aligned}
\qquad \cdots (2-18)
$$



第2－8図　円筒形状の試料の一部

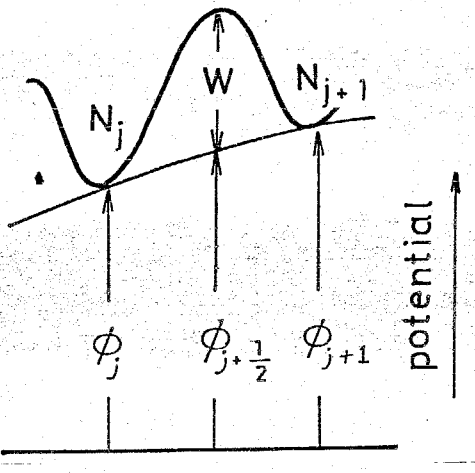
となり，方程式の形はx－y直交座標系で得られた（2－10）式と全く同じであることがわかる。ただし，$Q_{i,j}$ などにおける添字は，円筒座標系での座標（r_i, θ_j）の位置を示している。そして，$Q_{i,j}$ は図中の斜線で示した部分の電荷密度は一定と考えるが，解析においては（r_i, θ_j）の位置にそれらがすべて $Q_{i,j}$ としてそこにあることを意味している。

以上，円筒形状の試料に対する基本方程式の作成法を述べたが，次の点に注意して置くことは重要である。すなわち，（2－10）式と（2－18）式を比較して明らかなように，扱かう座標系が変化しても基本方程式の構造は変化しないということである。この性質は，微分方程式より導かれる差分式は微分方程式が座標系によって変化するのに呼応して差分式も変化するのと非常に異なるものでありホッピング数値計算法の特徴と言えよう。

2－6．ホッピング数値計算法の等価回路

ホッピング数値計算法の等価回路を考えることは，二次元電界計算などを進める上で見通しをよくする。このことは第12章で詳しく述べるので，以下では概略を示す。

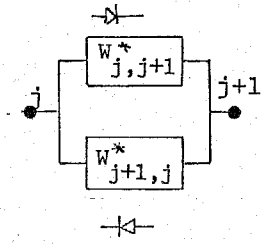
ホッピング数値計算法の等価回路を考えるための基本は，第2－9図に示されるニつのポテンシャル井戸で結ばれる系を一つの単位とすることである。その場合，この系はjからj＋1，j＋1からjへの電荷の流れ J_j，J_{j+1} で構成されて以下のように書き表わされる。



第2－9図　二つの井戸で結ばれる系

$$\begin{bmatrix} J_j \\ J_{j+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \omega_{j,j+1} & -\omega_{j+1,j} \\ -\omega_{j,j+1} & \omega_{j+1,j} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \delta N_j \\ \delta N_{j+1} \end{bmatrix} \quad \cdots\cdots (2-19)$$

そして，この系はωで構成される成分からなるマトリクス（遷移マトリクス）で特徴づけられることがわかる。さらに，（2－19）式で示される系は，第2－10図のように等価的に表わすことができる。ただし，$\omega_{j,j+1}$，$\omega_{j+1,j}$は一方向のみの電荷の移動を許すダイオード素子である。実際の数値計算においては，これらの素子の接続と合成された遷移マトリクスの関係が問題となるが，詳細は第12章で述べることにする。



第2－10図
ホッピングモデルの等価回路

2－7. ホッピング数値計算法の有効性について

本論文で述べるホッピング数値計算法の有効性は章が進むにつれて明らかにされる。この節では，それに先立ち有効性が導かれる理由を簡単に列挙する。

今まで述べてきたように，ホッピング数値計算法において導かれる基本式は電導現象を基盤とした方程式であり，微分方程式を差分近似して得た方程式とは基本的に異なる。まず第1に，ホッピング数値計算法の基本方程式は現象より直接に作成されるものであるから，記述される方程式の表現は一通りである。付録1で差分方程式との比較をしたが，差分法では近似の仕方により種々の方程式が得られることとは非常に異なっている。従って，ホッピング数値計算法での基本方程式は非常に扱いやすい。第2には，ホッピング数値計算法によって導かれる基本式は現象を基盤としているので，現象に伴なう境界条件を容易に方程式系に代入することができる。例えば，電極面が荷電粒子に対してブロッキングとなるイオン伝導現象の境界条件は，境界を含む領域n内における電荷の運動方程式を$dN_n/dt = \omega_{n-1,n}N_{n-1} - \omega_{n,n-1}N_n$として考えればよい。つまり，n領域における粒子に対してはn－1の領域における粒子の交換だけを考えればよいと言う意味で，$\omega_{n,n+1} = \omega_{n+1,n} = 0$なる条件

を代入すればよく，これは現象的にみて極めて自然である。第3には，微分方程式では材料の形状が異なると座標系を変換して考える。それは，微分方程式が極限における物理現象の表現であり，一点における電荷密度の時間的な変化を表わすものであるので，扱かう座標系により方程式が当然に変化するのである。一方，ホッピング数値計算法は現象より基本方程式を導くので，二次元，三次元では遷移する領域を追加するのみであり実質的な方程式系の変化は伴なわない。従って種々の形状変化を容易に方程式系に代入できる。最後に，ホッピング数値計算法は現象を基盤としているので，直観的イメージが非常にはっきりしており，方程式の作成およびその方程式の持つ意味など非常に考え易い。

2-7 まとめ

本章では，誘電体中の空間電荷を形成する荷電粒子による拡散とドリフトからなる電導現象に対して，その解析を行なう手段として新しい解析法であるホッピング数値計算法の提案をした。そして，2-2でイオン伝導モデルよりその基本的な考え方を示し，2-3以降でこれをもとにしてホッピング数値計算法の拡張を行なった。さらに，2-6で同計算法の等価回路について触れ，2-7ではこの計算法の有効性を述べた。

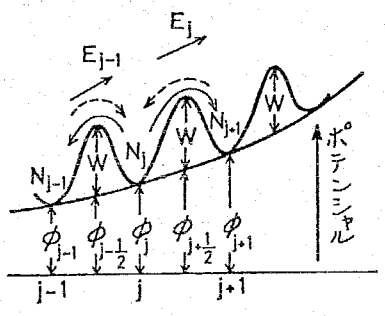
第 3 章　定常状態におけるイオン空間電荷分布並びに分極の解析

3-1. まえがき[22]

本章では，絶縁体中の可動イオンによる空間電荷分極の定常状態における分極や電荷分布をホッピング数値計算法を用いて扱かう。この問題については，すでにイオンの拡散とドリフトを考慮してポアソンの式で与えられる空間電荷電界を取入れ，膜内の諸量を連続的に扱かって解析されている。[15),(16)]本論文でも，付録3において従来よりも広範囲の印加電圧に対して適用できる解析を示している。そのため，ホッピング数値計算法による解析が必ずしも必要ではないと考えられようが，第2章でも述べたように非定常問題を扱かう際の初期定常分布など，初期条件を決定する際に必要となる。ただし，ホッピング数値計算法はイオンホッピング伝導の説明に用いられているポテンシャル井戸の間を遷移してイオンがホッピングする取扱いによって解析するのであるから，電流が電界に対して双曲線的に変化する事実をそのまま取入れている。従って，イオン伝導に対しては，移動度と拡散定数で記述される連続モデルによる解析よりもむしろ適切と考えられる。また，本章で述べる計算法は，その他の定常分布を求める際に参考となる。

3-2. 基本方程式[22]

本章で扱かうホッピング数値計算法は，第2章で詳しく述べたように，可動イオンがポテンシャルの山を越えて相隣る井戸間を遷移するイオン伝導のポテンシャルを試料全体に拡張したものである。そして，平行平板電極間の試料内に n 個の等しいポテンシャルの山があるとするもので，荷電粒子の位置および電位は第3



第3-1図　試料内の電荷の位置および電位

-1図に示す通りである。その場合，次の条件を仮定している。

(i) 試料内に単一の過剰な可動イオンが存在する。

(ii) 電極面は可動イオンに対しブロッキングである。

(iii) 可動イオンの遷移，つまりホッピングは隣接する井戸へのみとする。

(iv) 試料内でのイオンの発生と消滅はない。

以上の条件で，電極面よりj番目の井戸におけるイオンN_jを記述する運動方程式は，

$$\begin{aligned} & dN_j/dt \\ = \; & \omega_{j-1,j} N_{j-1} - \omega_{j,j-1} N_j \\ & + \omega_{j+1,j} N_{j+1} - \omega_{j,j+1} N_j \end{aligned} \quad (j = 1, 2, \cdots, n-1) \qquad \cdots\cdots\cdots (3-1)$$

ここで，$\omega_{j,j+1}$，$\omega_{j,j-1}$はそれぞれj番目の井戸からj+1番目の井戸へ，j番目の井戸からj-1番目の井戸への遷移確率を示し，井戸におけるイオンの数をνとして次式で示される。

$$\left.\begin{aligned} \omega_{j,j+1} &= \nu \exp\left(-\frac{W}{kT}\right) \cdot \exp\left\{-\frac{q}{kT}\left(\phi_{j+\frac{1}{2}} - \phi_j\right)\right\} \\ \omega_{j,j-1} &= \nu \exp\left(-\frac{W}{kT}\right) \cdot \exp\left\{-\frac{q}{kT}\left(\phi_{j-\frac{1}{2}} - \phi_j\right)\right\} \end{aligned}\right\} \qquad \cdots\cdots\cdots (3-2)$$

ただし，Wは第3-2図のWでなくてqWを意味している。

従って，(3-1)式が本章で扱かう基本式となるが，(i)～(iv)の各条件は次のようにして式中に組み込まれている。

(i)の条件　空間電荷の形成については(3-1)式中のN_jのみで考えることによる。

(ii)の条件　遷移確率$\omega_{0,1}$，$\omega_{1,0}$，$\omega_{n,n+1}$，$\omega_{n+1,n}$をすべて零と考えることによる。

(iii)の条件　(3-1)式の作成にもみられるように隣接する領域への電

荷の遷移を表わす成分のみで方程式を立てる。

(IV)の条件　(3-1)式中にこの効果を入れないことによる。

以下の解析では，(3-1)～(3-2)式が用いられる。

3-3. 数値計算のための解析と計算例[27]

<3-3-1> 解析

各ポテンシャル井戸間では諸量が直線近似で表わされるものとする。すなわち電位は直線的に変化し，電界は均一とするなどである。本章では定常状態を取扱うので，(3-1)式の左辺は零となり，各井戸間のイオンのつり合いより，

$$\omega_{j,j+1} N_j = \omega_{j+1,j} N_{j+1} \quad (j = 1, 2, \cdots, n-1) \quad \cdots\cdots (3-3)$$

(3-3)式に(3-2)式を用いて

$$\phi_{j+1} - \phi_j = \frac{kT}{\delta} \ln \frac{N_j}{N_{j+1}} \quad \cdots\cdots (3-4)$$

第3-1図に示したように，jとj+1番目の井戸間の電界を均一とし，これをE_jとすれば$\phi_{j+1} - \phi_j = -\ell E_j$で示され，絶縁膜中の全イオン数$N_t$を用いて次の関係式を得る。

$$E_{j+1} = \frac{\delta N_t}{\varepsilon} \cdot \frac{N_{j+1}}{N_t} + E_j, \quad \frac{N_{j+1}}{N_t} = \frac{N_j}{N_t} \exp\left(\frac{\delta \ell}{kT} E_j\right)$$

$$(j = 1, 2, \cdots, n-1) \quad \cdots\cdots (3-5)$$

ここで，εは誘電率である。(3-5)式を用いてイオンの分布N_j/N_tを定めていくが，その際以下の境界条件を満足しなければならない。まず，ガウスの法則から電極1と2の界面の電界をE_0，E_nとして

$$E_n - E_0 = \frac{\delta N_t}{\varepsilon} \quad \cdots\cdots (3-6)$$

電極間にV_Bなる電圧が印加され，電極1の電位を零とすれば，

$$V_B = \phi_n = -l \sum_{j=1}^{n-1} E_j \qquad \cdots\cdots (3-7)$$

試料の厚さ，つまり電極間距離 d と l との間には．

$$d = (n-1)l \qquad \cdots\cdots (3-8)$$

イオン数の間には

$$\sum_{j=1}^{n} \frac{N_j}{N_t} = 1 \qquad \cdots\cdots (3-9)$$

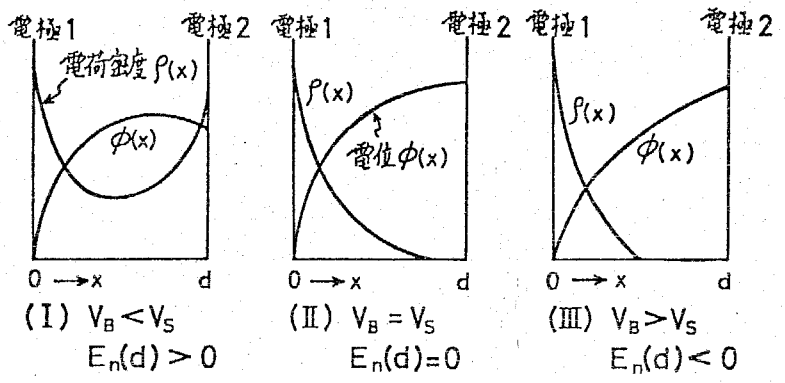
さて，以上示した（3－5），（3－9）式の関係を用いて N_t，l，d，V_B などが与えられたときの定常的なイオン分布 N_j / N_t を定めるが，イオン空間電荷分極の大小つまり印加電圧 V_B の大小によって第3－2図に示すように三通りに区分して取扱う。すなわち，

（i）V_B の比較的小さい場合

（ii）V_B が大きくなり，$E_n = 0$ となる場合

（iii）更に V_B が大きい場合

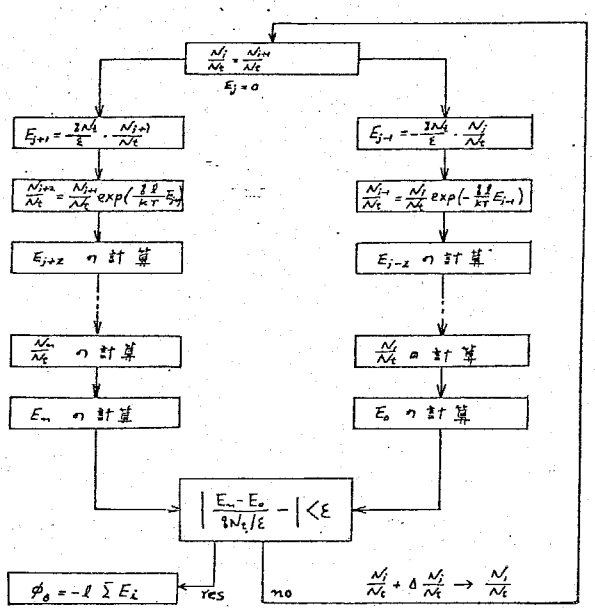
いま，（ii）項の $E_n = 0$ の実現する V_B を V_S とおけば，上記三通りの場合は，それぞれ（Ⅰ）$V_B < V_S$，（Ⅱ）$V_B = V_S$，（Ⅲ）$V_B > V_S$ の場合に相当する。



第3－2図　イオン空間電荷分極の計算についての三領域の説明図

(I) $V_B < V_S$ の場合 (27)

この場合は試料内に電界が零となる，いわゆるZero-field-planeが存在するので，その場所（$E_j = 0$）をまず適宜選定し，また0～1の間にある N_j / N_t の値も任意に選んで（3-5）式によって逐次計算を進める。これらの場所並びに値は全く任意でよいが，ここでの計算は $E_m = 0$，$N_m / N_t = 0$ から出発している。N_j / N_t を少しずつ変えながら計算を繰返し，得られた E_m，E_0 が（3-6）式を満たすように N_j / N_t を定める。このとき定められた一連の E_j は，一般に（3-7）式を満たさないので，Zero-field-plane さずらして上記と同様な計算を繰返して（3-6）式を満たし，その上（3-7）式を満足するような状態を求める。このような逐次計算を繰返すことにより，得られた N_j / N_t，E_j の値は結局（3-5）式を満たし，その上（3-6）～（3-9）式の境界条件を満足していることになる。jの位置は不連続に存在するので必ずしも与えられた V_B に対して正確に（3-7）式を満足しないが，井戸間で諸量を直線近似して補正することもできる。第3-3図には，この場合の計算のアルゴリズムを流れ図で整理して示した。



第3-3図 $V_B < V_S$ の場合の計算のアルゴリズム

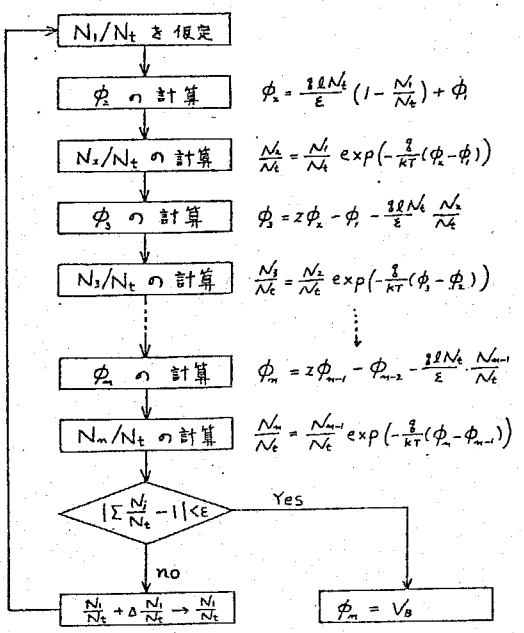
(II) $V_B = V_S$ の場合

この場合には電極え（第3-2図参照）における電界が零となることから，$E_m = 0$ と考えて計算できる。これは（I）項における特別な場合に相当し，各部の電界およびイオン粒子数を逐次計算することにより（I）項と同様に取扱える。すなわち，（3-5）式による逐次計算で得られる E_0 の値が（3-

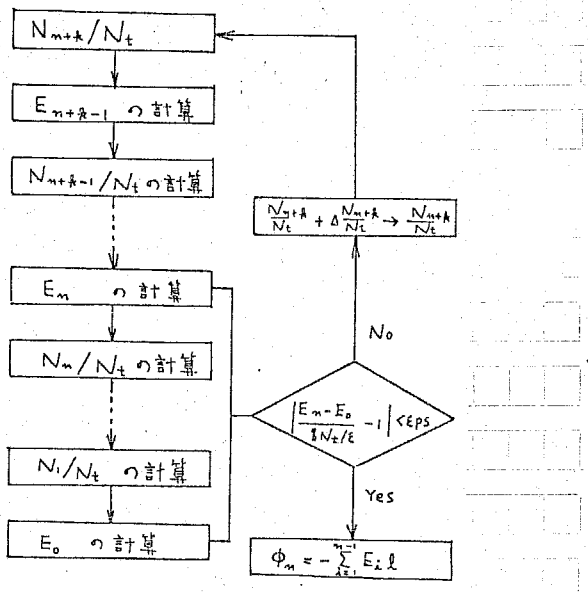
6）式を満たすように N_m / N_t の値を少しずつ変化させて逐次計算を繰返す。このような $E_m = 0$ の状態の実現する印加電圧は特別な V_s のときであり，この V_s は（3－7）式から求められる。（Ⅰ）項同様，この場合の計算のアルゴリズムを第3－4図に流れ図で示した。

（Ⅲ） $V_B > V_s$ の場合

この場合には絶縁膜内部では zero-field-plane は存在しない。そこでホッピングモデルを拡張し，仮想的にホッピング可能な位置が m（$> n$）個絶縁膜の外側まであると考え，m 番目の位置で電界が零になっているとする。そして，これら m 個の位置においてイオン粒子の間につり合いがとれているとする。従って，（3－5）式で j を $m-1$ まで拡張して取扱うことができる。そこで，この場合は m 番目の位置で電界が零になるとしているので，（Ⅱ）項の場合と同様に条件を満たすように逐次計算をすることができる。すなわち，N_m / N_t を変えて（3－5）式から得られる E_0，E_m が（3－6）式を満たすようにする。こ



第3－4図　$V_B = V_s$ の場合の計算のアルゴリズム



第3－5図　$V_B > V_s$ の場合の計算アルゴリズム

のときE_j（$j=1, 2, \cdots, n-1$）から得られる（3－7）式の関係は一般に印加電圧V_Bで満たされないので，更にnの値を変えて同様な計算を行なって（3－6）式と（3－7）式を満たすようにする。このとき得られたN_j / N_t（$j=1, 2, \cdots, n$）が求めるイオン分布である。ただし，この場合の計算のアルゴリズムは第3－5図の流れ図に示すようである。

以上，（Ⅰ）～（Ⅲ）項に述べた手順でイオン空間電荷分布の計算ができるが，明らかに電荷分布と同時に各場所における電界も求められる。更に各場所における電位は次式を用いて求められる。

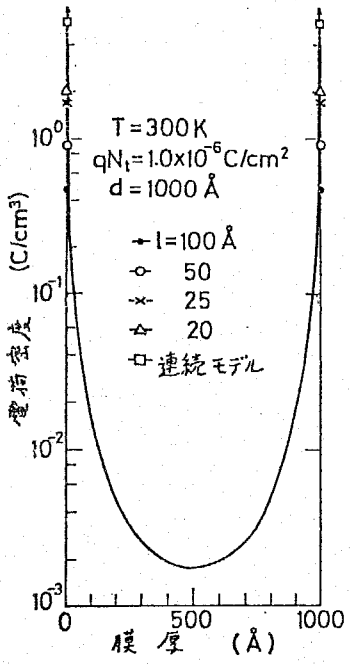
$$\phi_j = -\ell \sum_{i=1}^{j-1} E_i \quad (j=1, 2, \cdots, n) \cdots (3-10)$$

（3－3－2）数値計算例

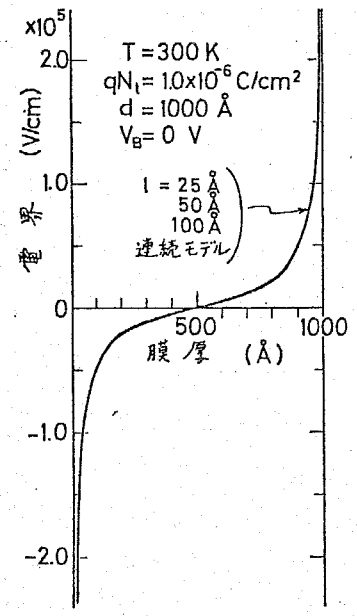
ホッピング距離ℓ，全イオン数N_t，印加電圧V_B，膜厚dなどが与えられた場合（定常状態の解を求めるときは第3－1図に示すポテンシャルの山の高さWには関係がない。このWの大きさは過渡現象において入ってくるものであることは双極子分極の理論と同様である。），まず前節の（Ⅰ）～（Ⅲ）項のいずれの状態にあるかを判定しなければならない。それには前節の（Ⅱ）項$V_B = V_s$の場合を計算して$E_n = 0$となる場合の印加電圧V_sを求める。このV_sが実際に印加される電圧V_Bより大きければ，この計算は（Ⅰ）項の方法により zero－field－plane が試料内にあるものとして行なう。逆に小さければ，電荷の偏りは実際はもっと激しいので，（Ⅲ）項の方法によることになる。このような判定と計算手順により得られた実例を示す。

（1）$V_B = 0$の場合

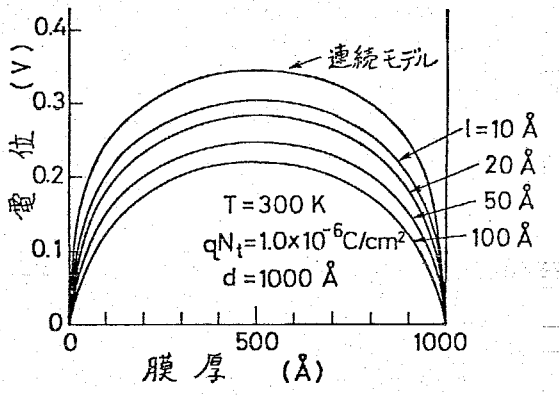
この場合は zero－field－plane は膜の最中にあり，前節（Ⅰ）項の計算手順により行なわれた。第3－6図は絶縁膜厚dが1，000Å，膜内の全電荷量qN_tが1.0×10^{-6}C／cm²，温度Tが300Kの場合について，ホッピング距離ℓが20，25，50，100Åの各場合および連続モデルの各部の電荷分布を示してある。この場合，電荷分布はホッピングモデルで



第3－6図 ホッピング距離を変えた場合のイオン空間電荷分布の計算例 ($V_B = 0$)



第3－7図 イオン空間電荷による絶縁膜中の電界の計算例 ($V_B = 0$)



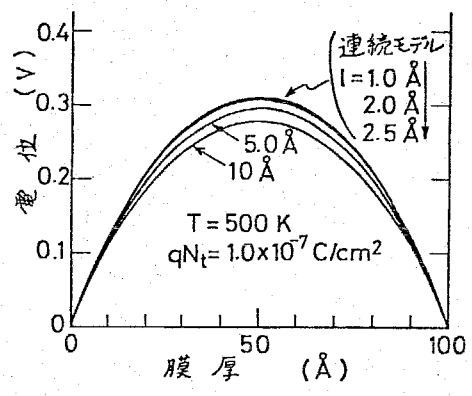
第3－8図 イオン空間電荷分布による絶縁膜中の電位の計算例

得られた各ポテンシャル井戸の電荷量 qN_j ($j = 1, 2, \cdots, n$) を l で割り，電荷密度で表わしてある。図より l を変えても，または連続モデルでも膜内ではほとんど濃度の変化はないが，両電極面では差が生じている。このことは，電荷はほとんど電極面により膜内ではあまり電界は強くないので，(3－2) 式で示される $\omega_{j,j+1}$ なる遷移確率は $\phi_{j+\frac{1}{2}} - \phi_j$ が小さいために $\phi_{j+\frac{1}{2}} - \phi_j$ に対して直線的になり，このことはホッピングモデルで l が異なっても，あるいは連続モデルでも同様にドリフト電流が電界に比例していることを示していると言えよう。しかし，電極面近くでは空間電荷により強い電界が発生してくる。

第3－7図は，第3－6図の結果より膜内の電界を計算したもので，やはり

膜内ではホッピングモデルでも連続モデルでも同様な値を与えるが，この図では示されないもっと高い電界，つまり両電極面近くでは差が現われてくる。

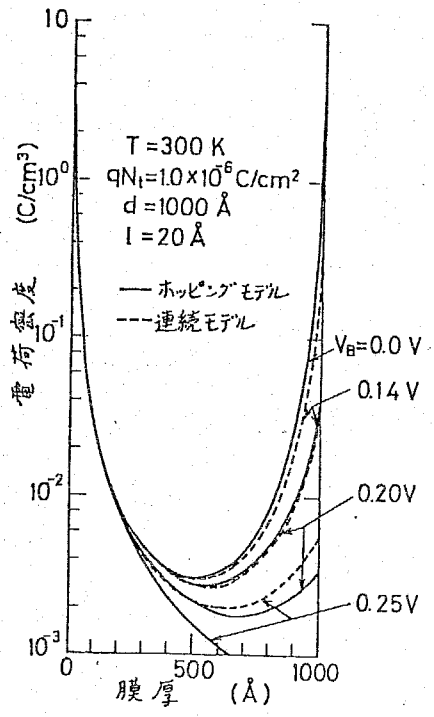
第3－8図は膜内の電位を求めたものである。この場合，当然電極面近辺の状態が膜内部へも直接影響するが，l を小さくすると連続モデルに近づいてゆく。例えば，井戸の数を同じ程度にとってホッピング距離 l を小さくするために膜厚100Åとし，絶縁膜内の平均イオン濃度を同じになるように全電荷量も1/10として計算すると第3－9図のようになり，l = 1Å，2.0Å，2.5Åの場合はほとんど連続モデルに一致している。



第3－9図　イオン空間電荷による絶縁膜中の電位の計算例（$V_B = 0$）

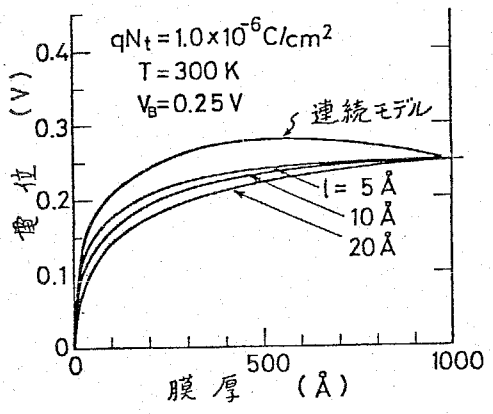
(2) $V_B \neq 0$ の場合

<3－3－2>節の計算に従って，印加電圧 V_B を変えて計算した濃度分布の結果を第3－10図に示す。この場合，qN_t を 1.0×10^{-6} C/cm² としたときの $E_m = 0$ となる電圧は $V_S = 0.23$ Vであった。連続モデルで計算した場合も示してあるが，その結果は $V_B = 0$ の場合と比較すれば，電荷のよった電極と逆の電極界面における分布の差が増大する。$V_B = 0.25$ Vと比較的大きな電圧を印加してホッピング距離 l を変えた場合の電荷密度分布の計算結果を

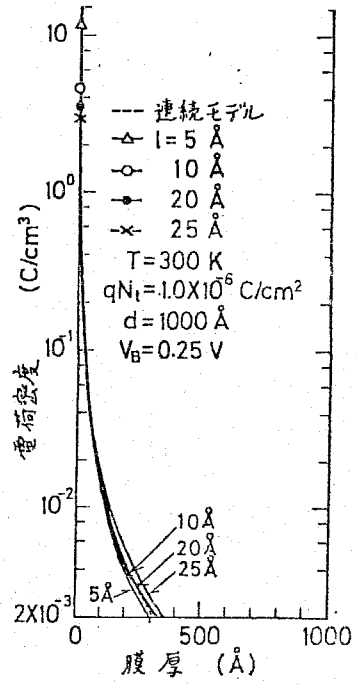


第3－10図　印加電圧を変えた場合のイオン空間電荷分布の計算例

第3－11図に示す。lの効果は$V_B = 0$の場合より大きい。更に電位分布も第3－12図に示す。



第3－12図　ホッピング距離を変えた場合のイオン空間電荷による絶縁膜中の電位の計算例



第3－11図　ホッピング距離を変えた場合のイオン空間電荷分布の計算例

電荷分布が決定されれば$V_B = 0$の場合を基準にして分極の電圧依存性を計算することができる。すなわち

$$P_l = \frac{q}{d}\left[\sum_{j=1}^{n}(j-1)l\,\left(N_j(V_B) - N_j(0)\right)\right]$$

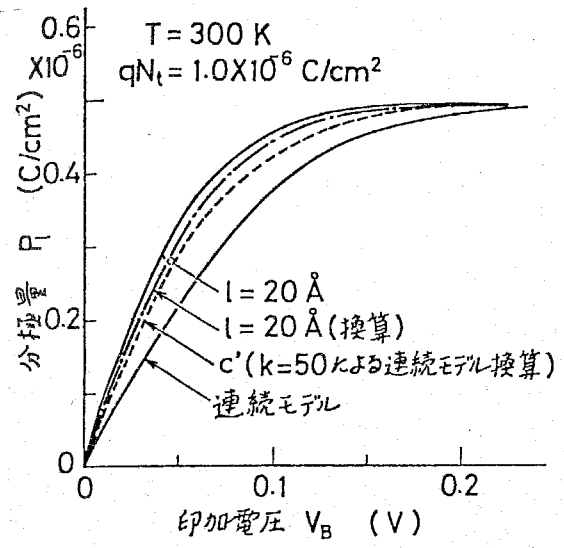
・・・・・・(3－11)

により分極量P_lを計算する。ただし，$N_j(V_B)$，$N_j(0)$はそれぞれ印加電圧がV_B，0のときの電荷分布である。また，次式により電極1からの電荷の平均位置$\bar{x}/d$を求めて，電荷の偏りの大体の様子を知ることができる。

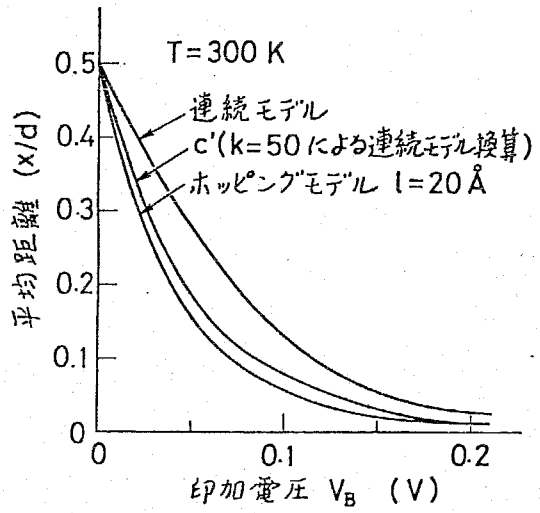
$$\frac{\bar{x}}{d} = \sum_{j=1}^{n}(j-1)N_j \Big/ (n-1)\sum_{j=1}^{n}N_j$$

・・・・・・(3－12)

第3－13図，第3－14図はその計算例であるが，連続モデルによる計算



第3－13図　イオン空間電荷による分極量の計算例



第3－14図　イオン空間電荷の電極からの平均距離

よりも分極は印加電圧に対して早く飽和する傾向が見られ，平均位置は小さくなる。

以上に計算例を示したように，ホッピング距離の影響は電界の高い所に生ずることになる。その主な原因は，イオンが第3－1図のようなポテンシャルの山を越えてホッピングで移動するとしたことによるのである。

3－4．薄い膜に対する取扱い

数値計算を行なう場合，ポテンシャルの山を100程度以上にすると厄介になってくる。薄い膜の試料については問題はないが，例えば数十μmの厚さの高分子フィルムなどではホッピング距離がかなり大きくてもポテンシャルの山は100以上になってしまうことは明らかである。従って，このような試料に対してはその数を減らして等価な計算をすることが必要となってくる。

さて，定常状態ではjとj＋1番目の井戸間で粒子の遷移はつり合っており，

$$\frac{N_j}{N_{tn}} \exp\left(\frac{\beta}{kT}\phi_j\right) = \frac{N_{j+1}}{N_{tn}} \exp\left(\frac{\beta}{kT}\phi_{j+1}\right)$$

$(j=1,2,\cdots,n-1)$ ・・・・・(3－13)

上式のn－1個の関係式（nは井戸の総数）から，

$$\frac{N_j}{l}=N_{tn}\exp\left(-\frac{q}{kT}\phi_j\right)\Big/\sum_{i=1}^{n}\exp\left(-\frac{q}{kT}\phi_i\right)l$$

・・・・・(3－14)

ホッピング距離がp倍になれば，$mp=n$として

$$\frac{N_k}{pl}=N_{tm}\exp\left(-\frac{q}{kT}\phi_k\right)\Big/\sum_{k=1}^{m}\exp\left(-\frac{q}{kT}\phi_k\right)pl$$

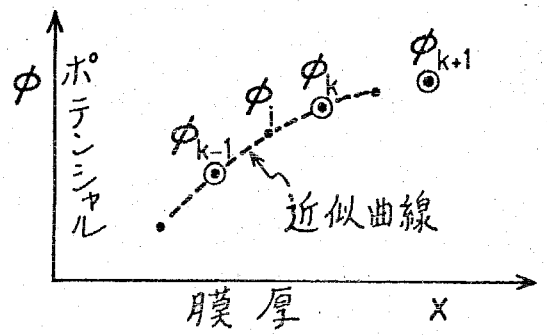
・・・・・(3－15)

(3－14)，(3－15)式での計算が等価であることは，膜内の同じ位置で電荷密度N_j/lとN_k/plおよび電位ϕ_jとϕ_kが等しくなることである。そのためには全粒子数N_{tn}とN_{tm}に対して，

$$\frac{N_{tn}}{N_{tm}}=\sum_{i=1}^{n}\exp\left(-\frac{q}{kT}\phi_i\right)l\Big/\sum_{k=1}^{m}\exp\left(-\frac{q}{kT}\phi_k\right)pl$$

・・・・・(3－16)

なる関係が成立していればよい。従って，ポテンシャルの数nとmについて計算してϕ_iとϕ_kを定めてやれば等価なN_{tn}/N_{tm}の値を定めることができるが，今はnが大きすぎて計算できない立場を考えているので，m個の場合の計算からn個の場合の電荷分布や電位を求めねばならない。それには次の方法で近似的な解決ができる。すなわち，電荷密度とポテンシャルが一致した場合，第3－15図のようにn個の場合のポテンシャルϕ_iはϕ_{k-1}とϕ_kとの間で一次近似として表わせるものとする。まず与えられた総粒子数N_tと異なるN_{tm}を用いてϕ_kを定め，これより$\phi_{k-1}-\phi_k$

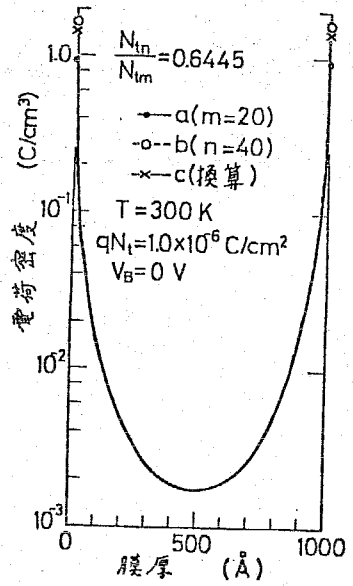


第3－15図　換算計算のための説明図

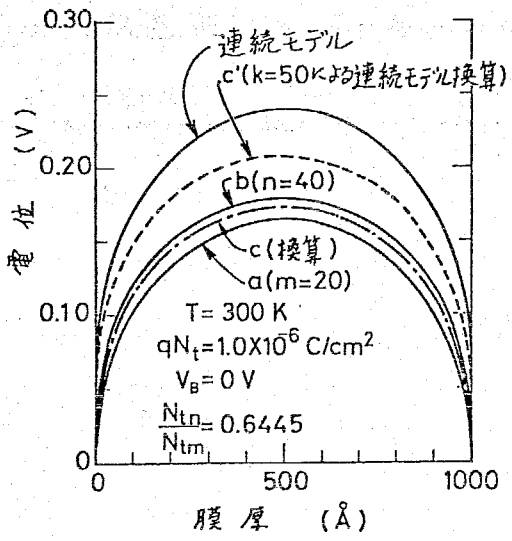
の間を近似でP等分してそれぞれ（3－16）式の右辺の分母，分子を計算することによりN_{tn}が定まる。このN_{tn}が与えられているものと異なるときはN_{tm}を更にずらし，N_{tn}が与えられている値になるまで計算を続ける。そして，それらが一致したときのN_{tm}なる総粒子数を用いてm個の場合について計算すれば，これがn個の場合の電荷密度とポテンシャルを与えることになる。実際には与えられた総粒子数N_tを用いてm個の山でϕ_k（$k=1, 2, \cdots, m$）を求め，このポテンシャルを設定し，（3－16）式で$N_t = N_{tm}$としてN_{tn}を計算する。ここに得られたN_{tn}を用いて新たに．

$$N_{tm} = \frac{N_t}{N_{tn}} \cdot N_t \qquad \cdots\cdots (3-17)$$

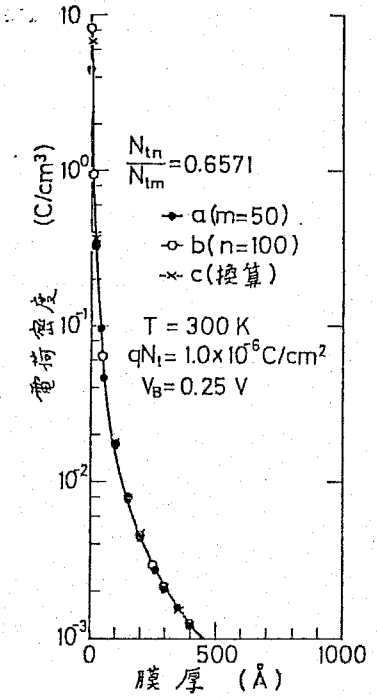
なるN_{tm}を出発点として，上述のように漸近的に計算を進めてゆけばよい。しかし，現実には上式のN_{tm}を用いてm個の場合を計算すれば，その結果はn個の場合にかなり近くなっていると考えられる。$n=40$，$m=20$の場合について，この換算計算を行なったものが第3－16図である。aの分布は$m=20$のもの，bは$n=40$のものである。これに対し（3－17）式から求



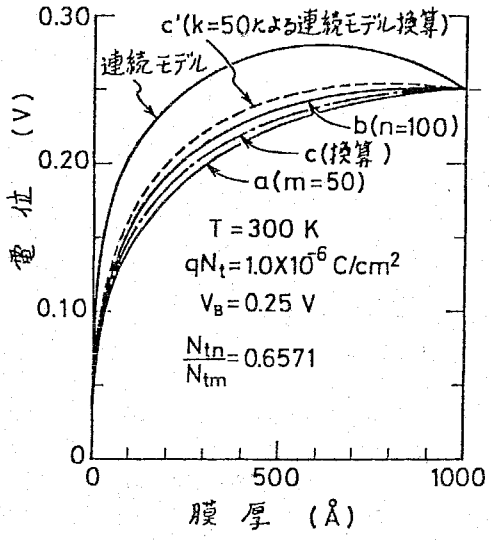
第3－16図　換算計算による
イオン空間電荷分布の計算例（$V_B=0$）



第3－17図　換算計算による絶縁膜
中の電位の計算例



第3－18図 換算計算による
イオン空間電荷分布の計算例
（V_B = 0．25 V）



第3－19図 換算計算による絶縁膜
中の電位の計算例（V_B = 0．25 V）

めたN_{tm}なる総粒子数を用いてm個で求めたのがCの分布であり，この一回の計算でCの分布はbの分布のかなり良い近似を得ることがわかる。更に一，二回の計算をすると，換算分布Cはbの分布にほとんど一致することが確かめられている。また，第3－17図には電位分布の換算結果を示した。やはり，（3－17）式による換算だけで換算値Cがbにかなり近くなっている。それぞれ図中には（3－17）式のN_{tn}/N_{tm}の値を示しておいた。

また，第3－18図，第3－19図はV_Bを印加したときの同様な計算結果である。更に同様な換算により連続モデルの等価計算もできる。すなわち，与えられた総粒子数N_tによりm個の山でϕ_kを求め，このポテンシャル間を直線近似で連続のポテンシャル$\phi(x)$を設定して次式

$$\sum_{k=1}^{m}\int_0^{p\ell}\exp\left\{-\frac{q}{kT}\left(\phi_k+\frac{\phi_{k+1}-\phi_k}{p\ell}x\right)\right\}dx$$

$$= \sum_{k=1}^{m} \exp\left(-\frac{q}{kT}\phi_k\right) p\ell \frac{kT}{q(\phi_{k+1}-\phi_k)}$$

$$\times\left[1-\exp\left\{-\frac{q}{kT}(\phi_{k+1}-\phi_k)\right\}\right] \quad \cdots (3-18)$$

を計算して，同様に（3－16）式を適用しN_{tm}（$n=\infty$）を求め，（3－17）式からN_{tm}を定めて計算してゆけばよい。$k=50$としてN_{tm}を求めて行なった換算結果を第3－17図，第3－19図にC′（連続モデル換算）として示しておいたが，連続モデルの値に近づいている。この換算は前述のように（3－17）式による一回の計算によったが，更に漸近的な計算をすれば連続モデルに一致させることができるであろう。また上記と同様な一回の換算値を第3－13図の分極量の計算にもC′として示したが，連続モデルに近づいていることがわかる。

3－5．収束法による電荷分布の計算[27]

3－3節で述べた数値計算法によれば，印加電圧Vの大きさにより，（Ⅰ）～（Ⅲ）項のどの場合にあたるかをまず調べなければならない。また，電界が零となるzero－field－planeをポテンシャルWの山の上とするなど離散的な場所しかとることができず，その結果は印加電圧をちょうど満足するように計算することが難かしかった。電荷分布の計算においては，印加電圧，総電荷量qN_tが定められたとき，分布などが求められるようにしておいた方が実際の実験値などと比較する場合に都合がよい。そのためには，以下のようにNewton法による収束計算を行なえばよい。

まず，（3－4），（3－5）式より次式が導かれる。

$$\frac{N_j}{N_t}\cdot\frac{N_{j+2}}{N_t} = \left(\frac{N_{j+1}}{N_t}\right)^2 \exp\left(\frac{q^2\ell N_t}{\varepsilon kT}\cdot\frac{N_{j+1}}{N_t}\right)$$

$$(j=1,2,\cdots,n-2) \quad \cdots\cdots (3-19)$$

また，（3－7）式の関係があるから，これに（3－4）式を代入すれば，

$$\frac{N_1}{N_t} = \frac{N_m}{N_t} \exp\left(\frac{qV_B}{kT}\right) \qquad \cdots\cdots (3-20)$$

従って，(3－9)，(3－19)，(3－20)式よりn元の非線形連立方程式が得られる。これらの式をニュートン法で解く場合には一階偏微分式を用意しなければならないが，付録4にあるようにきわめて簡単な形となる。ところでニュートン法は，初期推定値により収束するかどうか，または収束速度の大小に大きな影響があるので，その値の設定は難かしい。本論文では，印加電圧が零に近い場合においては均一分布を仮定し，大きくなった場合には次のように指数分布を仮定して計算を行なった。すなわち，

$$\frac{N_j}{N_t} = a\,\gamma^j \qquad \cdots\cdots (3-21)$$

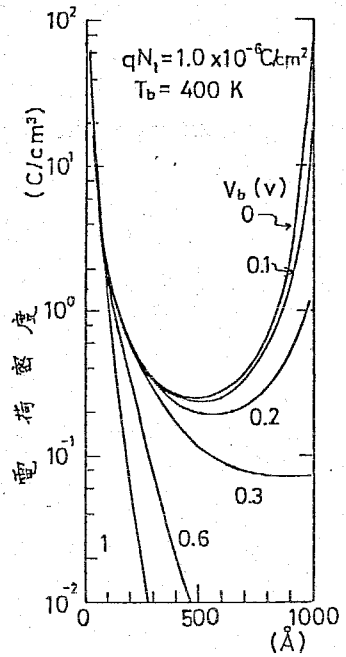
とし，これを(3－9)，(3－20)式に代入して

$$\left.\begin{aligned} a &= (1-\gamma)/\gamma(1-\gamma^n) \\ \gamma &= \exp(-qV_B/(n-1)kT) \end{aligned}\right\} \cdots (3-22)$$

よりa，γを定めて，これを初期値とした。

この方法によって電荷分布を求めた計算例を第3－20図に示す。結果は第3－10図とほとんど同じである。

後の章の分布計算では，その多くがこの方法により求められた。



第3－20図　収束法による電荷分布の計算例

3-6. まとめ

本章では，拡散と空間電荷電界を共に考慮して，定常状態におけるイオン空間電荷分布並びに分極をホッピング数値計算法を用いて解析を行ない，その有効性を示した。勿論，この方法は数値計算法であって解析解は得られないが，各種の境界条件でイオン分布を決定し分極を求められることが明らかとなった。現実にホッピングの山の数が多い場合でも数を減少させて等価な計算もできることも同様であった。更に，このモデルでは数値計算がかなり容易であるので，電極面における現象やイオンの中性化や再イオン化の問題も取入れて計算できると考えられる。

第 4 章　イオン過渡電流の解析とそのホッピングパラメータ測定への応用に関する研究

4-1 まえがき[28)~29)]

本章では，ホッピング数値計算法を用いて可動イオンによる過渡電流特性の解析を行なう。ここで取扱う可動イオンの過渡的な輸送問題は，イオン伝導並びに空間電荷の変動過程を明らかにするものであり，従来この種の現象をイオンの拡散定数と移動度を用いて扱かう場合には，境界条件による式の複雑化や拡散と空間電荷電界を共に考慮することの困難性から，拡散あるいは空間電荷を無視したり境界条件を簡略化するなどされている。[8),28)]そこで本章では，上記のような難解な問題に対して比較的容易に適用できるホッピング数値計算法による解析を記述する。前章にも述べたが，この方法では解析的な解は得られない。[29)]けれども，ホッピングのポテンシャル井戸に存在する個々のイオンの動きをイオンの遷移確率で記述するので，ドリフトや拡散の効果が極めて自然な形で導入され，またイオンの電荷によるポアソンの式も容易に用いられる。また，イオンホッピングのモデルを基盤としているので，例えば試料を $n-1$ 等分した場合の長さ l は，ホッピング距離というホッピングパラメータとしての意味を持つことになる。以下に数値計算のための解析を示すと共に，イオンの運動を記述する方程式の特性を若干理論解析する。次いで，よく知られている極性反転電流にピーク値の発生することを数値計算で検討する。更に，試料のピーク電流実測値，その測定条件を模擬した数値計算結果および理論解析などによって，イオンの移動度など可動イオンの特性に関するホッピングパラメータを知りうることを示す。

4-2 基本方程式[22)]

本章で扱かうホッピング数値計算法におけるモデルは前章で述べたものと同様であり，仮定した条件も同じである。その場合に得られた基本方程式のみ以

下に整理して示す。すなわち，

$$
\begin{aligned}
dN_1/dt &= -\omega_{1,2} N_1 + \omega_{2,1} N_2 \\
dN_j/dt &= \omega_{j-1,j} N_{j-1} - \omega_{j,j-1} N_j \\
&\quad + \omega_{j+1,j} N_{j+1} - \omega_{j,j+1} N_j \\
&\quad (j = 2, 3, \cdots, n-1) \\
dN_n/dt &= \omega_{n-1,n} N_{n-1} - \omega_{n,n-1} N_n
\end{aligned}
\qquad \cdots\cdots (4-1)
$$

ただし，

$$
\left.
\begin{aligned}
\omega_{j,j+1} &= \nu \exp\left(-\frac{W}{kT}\right) \exp\left\{-\frac{\delta}{kT}\left(\phi_{j+\frac{1}{2}} - \phi_j\right)\right\} \\
\omega_{j+1,j} &= \nu \exp\left(-\frac{W}{kT}\right) \exp\left\{-\frac{\delta}{kT}\left(\phi_{j+\frac{1}{2}} - \phi_{j+1}\right)\right\}
\end{aligned}
\right\}
\qquad \cdots\cdots (4-2)
$$

そして（4－1）式中には，第2章で述べたように拡散とドリフトに相当する効果が入っている。また，空間電荷電界はポテンシャルϕ_jに関係し，ϕ_jはポアソンの式を満足するとして付録5より次のように書ける。

$$
\phi_j = \frac{\delta l^2 N_t}{d\varepsilon} \left\{ (n-j) \sum_{i=1}^{j} (i-1) \frac{N_i}{N_t} + (j-1) \sum_{i=j+1}^{n} (n-i) \frac{N_i}{N_t} \right\} + \frac{j-1}{n-1} V
\qquad \cdots\cdots (4-3)
$$

以上がホッピングモデルで電荷輸送を記述する基本式であるが，境界条件としては印加電圧Vに対し$\phi_1 = 0$として，

$$
\phi_n = V \qquad \cdots\cdots (4-4)
$$

および，絶縁体試料内に含まれる全イオン量をN_tとして

$$
N_t = \sum_{j=1}^{n} N_j \qquad \cdots\cdots (4-5)
$$

が成立している。

4－3 解 析

ここでの数値計算では，主として外部回路に流れる電流の時間特性を求める。その際，電荷分布と経時変化も明らかとなるので，試料内の電位，電界などの分布やその時間変化も求められる。

＜4－3－1＞ 薄い試料の場合

ここでは，試料内に考えられるポテンシャルの数が電算機による数値計算が容易に行なえる100程度以下の場合を考える。MIS試料を例にとれば，イオンホッピング距離は10Å程度であるから，この場合は1000Å程度の薄い試料を考えていることになる。[28]

さて，外部回路の電流は分極の時間変化であるが，分極にはここで問題とするイオン空間電荷分極のほかに双極子分極も含まれるが，後者は緩和時間が小さく，その電流への寄与は双極子の誘電率をεとして変位電流$\partial D/\partial t = \varepsilon(\partial E/\partial t)$で示されるとする。イオン電荷濃度分布$\rho(x, t)$はポテンシャル井戸近辺の平均濃度$qN_j/l$によって表わせるとし，δ関数を用いて

$$\rho(x, t) = \sum_{j=1}^{n} q\frac{N_j}{l}\delta\{x-(j-1)l\} \quad \cdots (4-6)$$

分極Pは$\rho(x, t)$と双極子とによる分極の和として示されるが，後者は電界$E(x, t)$に比例する量としてよいので，これを$k_1E(x, t)$（k_1は比例定数）とすると

$$P(t) = \frac{1}{d}\int_0^d x\{\rho(x,t) - \rho(x,t_0)\}dx + \frac{1}{d}\int_0^d k\,E(x,t) \quad \cdots (4-7)$$

ただし，$\rho(x, t_0)$は初期t_0におけるイオン電荷の分布

外部回路の電流Iは（4－7）式の時間変化として示されるが，このうち右辺

第2項の積分は印加電圧をVとして $\int_0^d k_1 E(x,t)\,dx = k_1 V$（一定）であることから電流には寄与せず，（4－7）式の時間微分に（4－6）式を用いて電流は次式で示される。

$$I(t) = \frac{ql}{d}\sum_{j=1}^{n}(j-1)\frac{d}{dt}N_j$$

$$= \frac{qN_t}{n-1}\sum_{j=1}^{n}(j-1)\frac{d}{dt}\left(\frac{N_j}{N_t}\right) \quad \cdots\cdots(4-8)$$

ただし，$d=(n-1)l$ とした。また，時間 t までに流れる電荷量 $Q(t)$ は，（4－8）式を積分して，

$$Q(t) = \frac{qN_t}{n-1}\sum_{j=1}^{n}(j-1)\left(\frac{N_j}{N_t} - \frac{N_j^\circ}{N_t}\right) \cdots(4-9)$$

ここで，N_j° は j 番目の井戸の初期におけるイオン数

さて，電流 $I(t)$，時間 t を次式

$$\left.\begin{aligned} I_b &= I(t)/\nu\exp(-W/kT) \\ t_b &= t\nu\exp(-W/kT) \end{aligned}\right\} \cdots(4-10)$$

で変換し，それぞれ I_b，t_b で表わせば，I_b は（4－8）式に（4－1），（4－2）式の基本関係を用いて

$$I_b = \frac{qlN_t}{d}\sum_{j=1}^{n}\frac{N_j}{N_t}\left[\exp\left\{\frac{q}{kT}(\phi_j - \phi_{j+\frac{1}{2}})\right\}\right.$$

$$\left. - \exp\left\{-\frac{q}{kT}(\phi_j - \phi_{j-\frac{1}{2}})\right\}\right] \quad \cdots\cdots(4-11)$$

更に，ϕ_j と $\phi_{j\pm\frac{1}{2}}$ の間を直線近似して扱えば，（4－3）式より

$$-\phi_j + \phi_{j+\frac{1}{2}} = -\phi_{j+\frac{1}{2}} + \phi_{j+1}$$

$$= \frac{ql^2N_t}{2d\varepsilon}\left\{\sum_{i=1}^{j}(i-1)\frac{N_i}{N_t} - \sum_{i=j+1}^{n}(n-i)\frac{N_i}{N_t}\right\} + \frac{V}{2(n-1)}$$

$$\cdots\cdots(4-12)$$

結局，電流I_b－時間t_b特性は，（4－1），（4－2）式より得られる式

$$\frac{d}{dt_b}\left(\frac{N_j}{N_t}\right) = \exp\left\{\frac{q}{kT}(\phi_{j-1}-\phi_{j-\frac{1}{2}})\right\}\frac{N_{j-1}}{N_t} - \left[\exp\left\{\frac{q}{kT}(\phi_j-\phi_{j-\frac{1}{2}})\right\}+\exp\left\{\frac{q}{kT}(\phi_j-\phi_{j+\frac{1}{2}})\right\}\right]\frac{N_j}{N_t} + \exp\left\{\frac{q}{kT}(\phi_{j+1}-\phi_{j+\frac{1}{2}})\right\}\frac{N_{j+1}}{N_t} \quad \cdots\cdots (4-13)$$

と（4－12）式から，（4－4），（4－5）式の境界条件を満たすようにN_j/N_tの時間変化を計算し，得られたN_j/N_tを（4－12）式に代入して$\phi_j \pm \phi_{j\pm\frac{1}{2}}$を求め，これらを（4－11）式に適用して決定できる。なお，N_j/N_tの時間変化の計算は，Runge－Kutta法を用いている。[27]

<4－3－2> 厚い試料への拡張

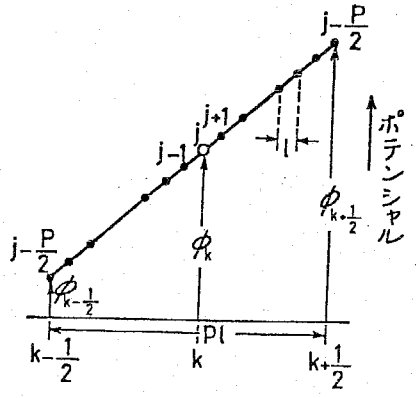
厚い試料では，ポテンシャルの山の数が多くなり，そのままでは計算時間が非常に長くなるので少ない時間で計算することが望まれる。そのような場合には，少ない山の数で近似的な等価計算を行なうことができる。すなわち，山の数がn個でホッピング距離がlであるときと，山の数がm個に減少して距離がp倍のplとなったときの電流は，（4－11）式より

$$I_b(l) = \frac{q l^2 N_t}{d}\sum_{j=1}^{n}\frac{N_j}{lN_t}\left[\exp\left\{\frac{q}{kT}(\phi_j-\phi_{j+\frac{1}{2}})\right\} - \exp\left\{\frac{q}{kT}(\phi_j-\phi_{j-\frac{1}{2}})\right\}\right]$$

$$I_b(pl) = \frac{q(pl)^2 N_t}{d}\sum_{k=1}^{m}\frac{N_k}{plN_t}\left[\exp\left\{\frac{q}{kT}(\phi_k-\phi_{k+\frac{1}{2}})\right\} - \exp\left\{\frac{q}{kT}(\phi_k-\phi_{k-\frac{1}{2}})\right\}\right] \quad \cdots\cdots (4-14)$$

で示される。

いま第4－1図のように，$k-1/2$と$k+1/2$の区間でイオン濃度とポテンシャルが直線的であるとし，jとkが両方の系で一致しているとする。$k-1/2$と$k+1/2$の区間にあるイオンによる電流は両系で，



第4－1図　ホッピングモデルにおける直線近似

$$\Delta I_b(\ell) = \frac{q\ell^2 N_t}{d} \sum_{j=j-P/2}^{j+P/2} \frac{N_j}{\ell N_t} \times \left[\exp\left\{ \frac{q}{kT}(\phi_j - \phi_{j+\frac{1}{2}}) \right\} - \exp\left\{ \frac{q}{kT}(\phi_j - \phi_{j-\frac{1}{2}}) \right\} \right]$$

$$= P \frac{q\ell^2 N_t}{d} \frac{N_j}{\ell N_t} \left[\exp\left\{ \frac{q}{kT}(\phi_j - \phi_{j+\frac{1}{2}}) \right\} - \exp\left\{ \frac{q}{kT}(\phi_j - \phi_{j-\frac{1}{2}}) \right\} \right]$$

$$\Delta I_b(P\ell) = \frac{q(P\ell)^2 N_t}{d} \cdot \frac{N_k}{P\ell N_t} \left[\exp\left\{ \frac{q}{kT}(\phi_k - \phi_{k+\frac{1}{2}}) \right\} - \exp\left\{ \frac{q}{kT}(\phi_k - \phi_{k-\frac{1}{2}}) \right\} \right]$$

・・・・・（4－15）

（4－15）式で両系の電流が等価であるためには，N_tは共通でイオン濃度$N_j/\ell = N_k/P\ell$とみてポテンシャルの直線関係を仮定すれば，

$$\phi_j - \phi_{j+\frac{1}{2}} = (\phi_k - \phi_{k+\frac{1}{2}})/P \equiv \tilde{\phi}_k - \tilde{\phi}_{k+\frac{1}{2}}$$

$$\phi_j - \phi_{j-\frac{1}{2}} = (\phi_k - \phi_{k-\frac{1}{2}})/P$$

$$\equiv \tilde{\Phi}_k - \tilde{\Phi}_{k-\frac{1}{2}}$$

・・・・・（4－16）

となるように，pℓ系のポテンシャルを$\tilde{\Phi}_k$のように変えて電流をpで割ればよい。このポテンシャル変換は（4－12）式からみて，各井戸の粒子数と印加電圧Vをpで割っておくことである。結局，ポテンシャルの数の少ないpℓ系で，その数の多いℓ系の電流を求めるには次の式を用いればよい。

$$\tilde{I}_b(p\ell) = \frac{q p \ell^2 N_t}{d} \sum_{k=1}^{m} \frac{N_k}{p\ell N_t} \left[\exp\left\{ \frac{q}{kT} \left(\tilde{\Phi}_k - \tilde{\Phi}_{k+\frac{1}{2}} \right) \right\} - \exp\left\{ \frac{q}{kT} \left(\tilde{\Phi}_k - \tilde{\Phi}_{k-\frac{1}{2}} \right) \right\} \right]$$

$$= \left[\frac{q(p\ell)^2 N_t}{2d\varepsilon} \left\{ \sum_{i=1}^{k} (i-1) \frac{N_i}{p\ell N_t} - \sum_{i=k+1}^{m} (m-i) \frac{N_i}{p\ell N_t} \right\} + \frac{1}{2} \langle E \rangle \right] \ell$$

ただし，$\langle E \rangle$：平均電界で$V / p\ell(m-1)$

・・・・・（4－17）

<4－3－3> $I_b \sim t_b$ 特性の相似性

前節でホッピングの山の数を減少させて等価計算をする方法を示した。すなわち，（4－14），（4－16）式によれば

$$\tilde{I}_p(p\ell) = I_b(\ell) = \frac{q p \ell^2 N_t}{d} \sum_{k=1}^{m} \frac{N_k}{p\ell N_t} \left[\exp\left\{ \frac{q}{kT} \left(\tilde{\Phi}_k - \tilde{\Phi}_{k+\frac{1}{2}} \right) \right\} - \exp\left\{ \frac{q}{kT} \left(\tilde{\Phi}_k - \tilde{\Phi}_{k-\frac{1}{2}} \right) \right\} \right]$$

・・・・・（4－18）

従って，$I_b(\ell)$，$\tilde{I}_b(p\ell)$の二つの$I_b \sim t_b$曲線を重ね合すには，$\tilde{I}_b(p\ell)$をP倍し（4－17）式による$\tilde{\Phi}_k \to \Phi_k$への変換をPによって行ない，そのうえ$N_j / \ell = N_k / p\ell$となるように$t_b$の変換をすればよい。$t_b$

の変換は（4－13）式で行なえる。すなわち，pℓ系では

$$\frac{d}{dt_b}\left(\frac{N_k}{p\ell N_t}\right)$$
$$= \left[\exp\left\{\frac{q}{kT}(\phi_{k-1}-\phi_{k-\frac{1}{2}})\right\}\frac{N_{k-1}}{p\ell N_t} - \exp\left\{\frac{q}{kT}(\phi_k-\phi_{k+\frac{1}{2}})\right\}\frac{N_k}{p\ell N_t}\right]$$
$$- \left[\exp\left\{\frac{q}{kT}(\phi_k-\phi_{k-\frac{1}{2}})\right\}\frac{N_k}{p\ell N_t} - \exp\left\{\frac{q}{kT}(\phi_{k+1}-\phi_{k+\frac{1}{2}})\right\}\frac{N_{k+1}}{p\ell N_t}\right]$$
$$= \exp\left\{\frac{q}{kT}(\phi_k-\phi_{k+\frac{1}{2}})\right\}\left(\frac{N_{j-1}}{\ell N_t}-\frac{N_j}{\ell N_t}\right)p$$
$$- \exp\left\{\frac{q}{kT}(\phi_k-\phi_{k-\frac{1}{2}})\right\}\left(\frac{N_j}{\ell N_t}-\frac{N_{j+1}}{\ell N_t}\right)p$$

・・・・・（4－19）

ただし，第4－1図に示したようなφとNの直線性を用いた。一方，ℓ系では同様にして．

$$\frac{d}{dt_b}\left(\frac{N_j}{\ell N_t}\right) = \exp\left\{\frac{q}{kT}(\phi_j-\phi_{j+\frac{1}{2}})\right\}\cdot\left(\frac{N_{j-1}}{\ell N_t}-\frac{N_j}{\ell N_t}\right)$$
$$- \exp\left\{\frac{q}{kT}(\phi_j-\phi_{j-\frac{1}{2}})\right\}\cdot\left(\frac{N_j}{\ell N_t}-\frac{N_{j+1}}{\ell N_t}\right)$$

・・・・・（4－20）

初期には$N_k / p\ell N_t = N_j / \ell N_t$であるから，任意の時点でこの電荷密度が等しくなるには，（4－19），（4－20）式で示されるその変化速度が等しくなるように時間t_bに変換を施せばよい。つまり，（4－20）式のℓ系の速度をp倍し，$\phi_j = \phi_k \rightarrow \phi_k$への変換を行なえばよい。このpによる変換は$I_b$の変換と全く同じである。しかし，変化速度の増加は同じ電荷密度になるまでの時間をその割合で減少させる。従って，I_bとt_bにそれぞれ逆数変換を行なえば$I_b \sim t_b$曲線を重ね合すことができる。この変換はpのみに関係し，これを$f(p)$として次式で示される。

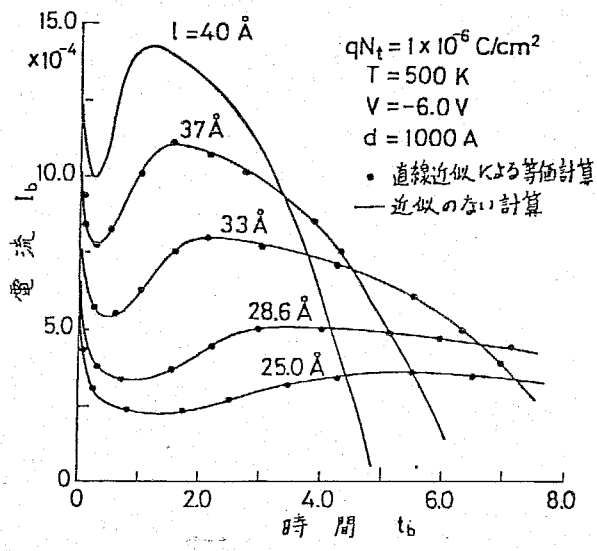
$$\left.\begin{aligned} I_b(p\ell) &= f(p)\, I_b(\ell) \\ t_b(p\ell) &= t_b(\ell)/f(p) \end{aligned}\right\} \cdots\cdots (4-21)$$

ここで，関数 $f(p)$ は $f(1)=1$ である。

4－4　数値計算例

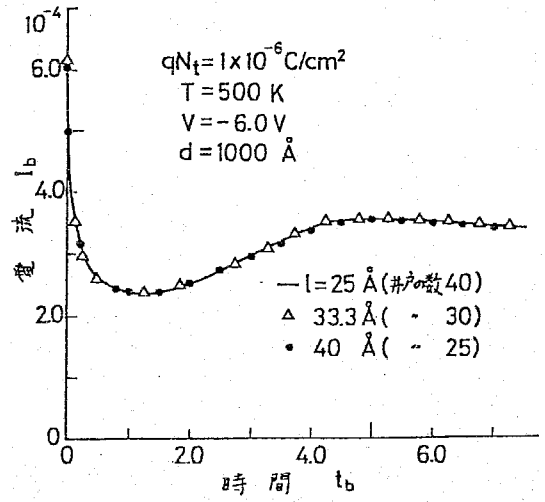
＜4－4－1＞　ホッピング距離を変えた場合の等価計算例

第4－2図実線は，初期イオン分布をイオン濃度の小さい電極界面で電界が零となる状態とし（第4－6図，$t_b=0$ の状態），ホッピング距離 ℓ を変えたときの $I_b \sim t_b$ 特性を示す。また，$\ell=40$ Å，つまりポテンシャルの山の数を25個として他の距離の場合を（4－16），（4－17）式によってそれぞれ等価計算したものを点で示すが，これらはほとんど一致している。更に山の数が多い場合には，N，ϕ の直線関係が成立するから同様な等価計算ができると考えられる。（4－21）式の変換関数 $f(p)$ は，数値計算からすぐ知れる。すなわち，第4－2図のピーク電流値より知れる $I_{bm}(p\ell)/I_{bm}(\ell)$ である。$\ell=25$ Åとして他のホッピング距離 $p\ell$ の場合の $I_b \sim t_b$ 特性を（4－12）式で換算した結果を第4－3図に示すがよく重なっていることがわかる。この $f(p)$ はほぼ p^2 に近い特性を持っており，$\exp\{q(\phi_j-\phi_{j+\frac{1}{2}})/kT\} \cong 1+q(\phi_j-\phi_{j+\frac{1}{2}})/kT$ と近似できるとき，$f(p)=p^2$ となる。

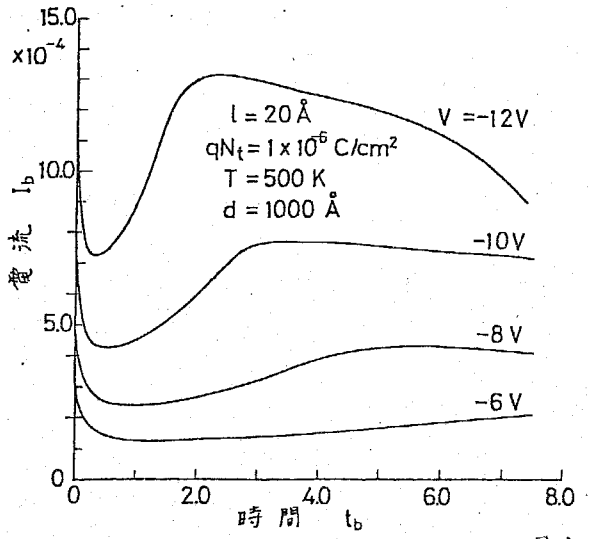


第4－2図　ホッピング距離 ℓ を変えた場合のイオン過渡電流および直線近似による等価計算例

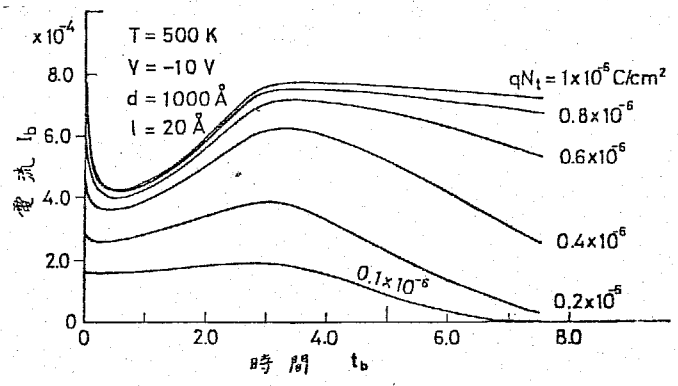
＜4－4－2＞　電流－時間特性に発生するピーク値[30)～34)]



第4－3図ホッピング距離の異なるイオン過渡電流の変換計算例



第4－4図　印加電圧を変えた場合のイオン過渡電流の計算例

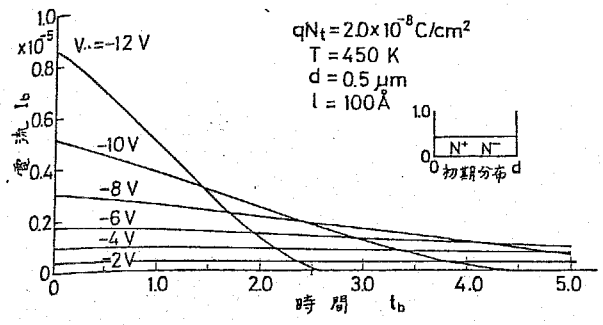


第4－5図　絶縁体中の全電荷量を変えた場合のイオン過渡電流の計算例

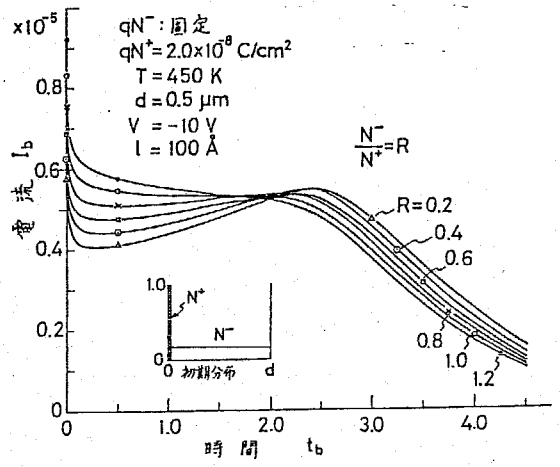
絶縁体の印加電圧極性反転時にピーク電流の発生する現象が見られているが[30),(31)]，本数値計算でも第4－2図のように同様な特性が見られる。特性の相似性からピーク値の発生はホッピング距離に関係せず生じるものと思われ，以下絶縁膜の厚さ1，000Å，ホッピング距離20Åの場合について数値計算例を示してゆく。初期イオン分布は，特に記さない限りイオン濃度の小さい電極界面で電界が零となった状態である。

第4－4図は極性反転電圧Vを変えた場合の$I_b \sim t_b$特性である。電流ピークの発生時間t_{bm}はVの大きいほど短くなっている。第4－5図は全イオン量N_tを変えた場合で，ピーク発生時間t_{bm}はそれほど変化していない。電流I_bはイオン量の増加と共に飽和する傾向がみられるが，t_{bm}以後の電流の減少が少なくなる。

また，正の可動イオンに対して負の固定イオンが試料内に均一に分布する場



第6図　試料内に負の固定電荷のある場合の過渡電流特性（$R = N^-/N^+ = 1$）

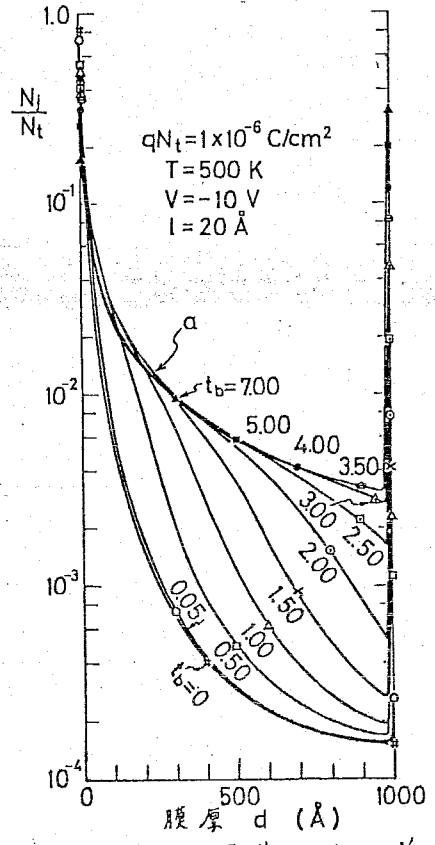


第7図　試料内の負の固定電荷量と正の可動電荷量の比を変えた場合

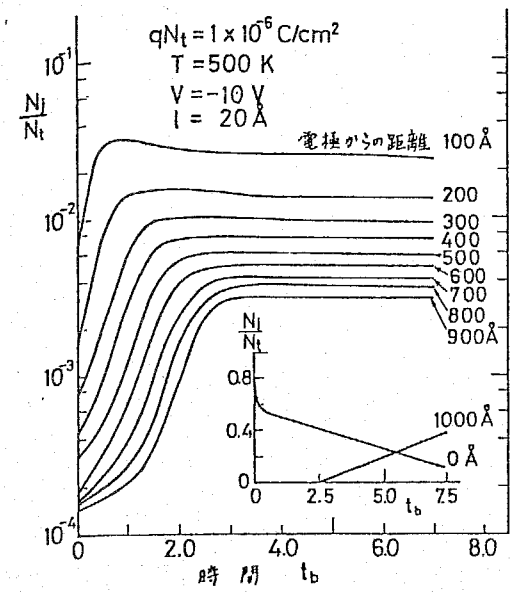
合の特性は，第４－６，７図に示すように可動イオン量が負の固定イオン量よりも過剰に試料内にあり，しかも可動イオンが初期に電極界面に寄っているときに過渡電流にピークが発生する。このことは，電流の充電特性と反転特性が非常に異なることを示しており興味深い。

＜４－４－３＞　電荷分布の挙動

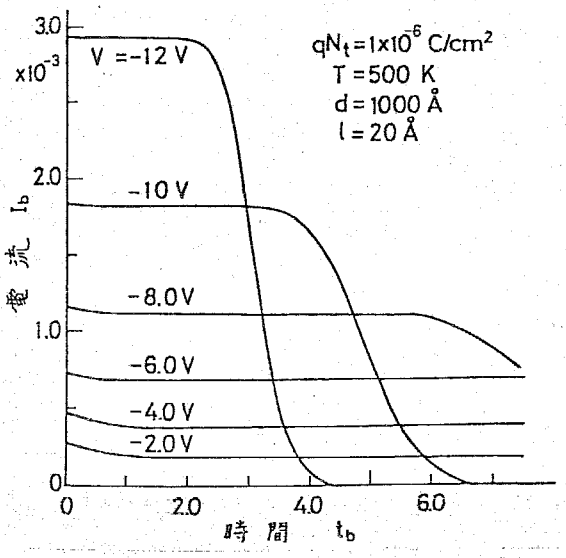
$I_b \sim t_b$ 特性の現われる過程で電荷分布を追跡するとかなり複雑な変化をすることがわかる。第４－８図は，第４－４図の $V = -10$ V の特性に対応する電荷分布の挙動である。最初電荷の偏っていた電極に近い位置から順次ほぼ一定の曲線aに近づいてゆく。その場合の各井戸のイオン濃度変化を図示したものが第４－９図である。両電極面ではイオン濃度が変化しているが，試料内では t_b が３～３．５なる時間でほぼ一定となり，この時間は第４－４図で電流ピークの発生する時間 t_{bm} に対応している。



第４－８図　イオン空間電荷分布の挙動



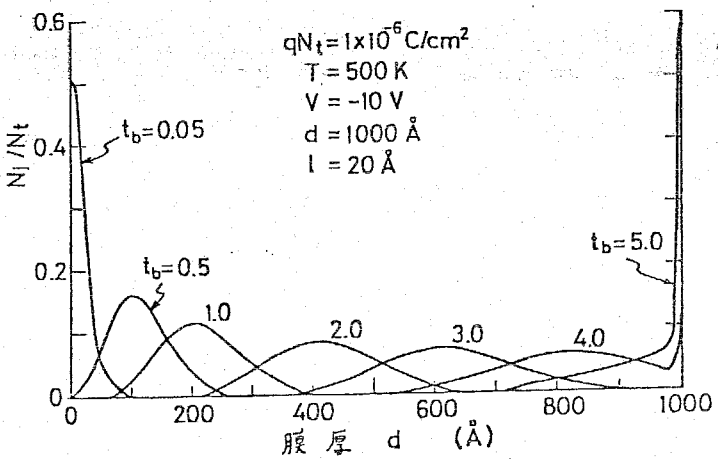
第4－9図　各井戸におけるイオン濃度の時間変化

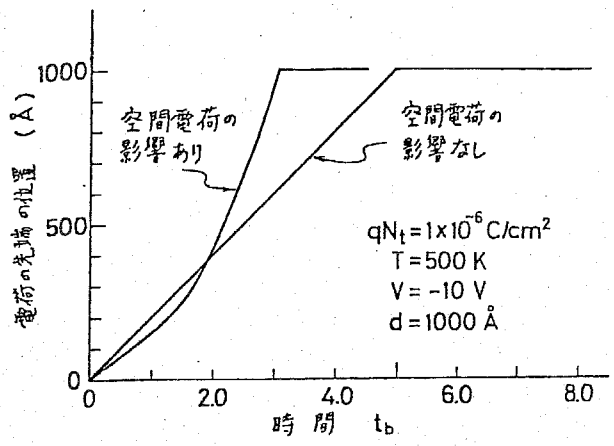


第4－10図　空間電荷電界の影響のない場合のイオン過渡電流の計算例

このような複雑な電荷の動きは空間電荷電界によるものと考えられ，この電界が無視されればもっと単純な挙動を示すであろう。ホッピング数値計算法でこの電界効果を除いて計算することは容易で，（4－3）式のϕ_jの表示を$\phi_j = (j-1)V/(n-1)$とすればよい。そのようにして計算した結果を第4－10図に示す。初期分布は電極面にすべての電荷が寄っているとしたが，この場合電流ピークは見られない。第4－11図には第4－10図の－10Vの特性の電荷の動きを示すもので，ピーク状になった電荷分布が拡散で幅広くなりながら反対電極へ移動してゆく。この場合，電荷分布のピークの位置は第4－12図に示すように

第4－11図　空間電荷電界の影響のない場合のイオン空間電荷分布の挙動





第4－12図　空間電荷電界の影響のある場合とない場合の電荷先端の動きの比較

等速で移動してゆく。なお，第4－8図に示した空間電荷電界を考慮したときの電荷の先端をα曲線に分布が一致したところとすれば，この先端の移動は第4－12図に併記したように時間と共に速度が増加する。以上述べたように空間電荷の影響の有無は，電荷の挙動に非常に大きな差異を与えることがわかる。

<4－4－4>　ホッピング距離および移動度の評価[30)~34)]

電圧印加後時間tまでに外部回路に流れた電荷量Q(t)は，電流をI(t)として(4－10)式を参照し，

$$Q(t) = \int_0^t I(t)\,dt = \int_0^{t_b} I_b\,dt_b \quad \cdots\cdots (4-22)$$

印加電圧が大きい場合はI_bを示す(4－11)式の右辺第2項を第1項に対し無視し，更に(4－12)式を用いて

$$Q(t) = \left[\frac{q l N_t}{d}\int_0^t \sum_{j=1}^{n}\frac{N_j}{N_t}\exp\left\{\frac{q}{kT}(\phi_j^\circ - \phi_{j+\frac{1}{2}}^\circ)\right\}dt_b\right] \times \exp\left\{\frac{q l}{2kTd}V\right\} \quad \cdots\cdots (4-23)$$

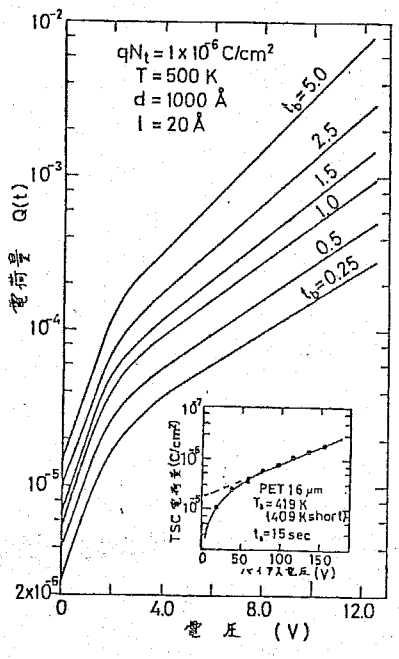
ここで，$\phi_j^\circ - \phi_{j+\frac{1}{2}}^\circ$は(4－12)式でV＝0の場合の$\phi_j - \phi_{j+\frac{1}{2}}$の値である。比較的初期には$N_j/N_t$の変化が少ないとみれば，$\phi_j^\circ - \phi_{j+\frac{1}{2}}^\circ$も変化が少なく，$t = t_b$を一定とし電圧Vを変えて電荷量$Q(t_b, V)$を測定すれば，

$$Q(t_b, V) = A\exp\left(\frac{q l}{2kT}V\right)$$

$$A = \frac{\beta l N_t}{d} \int_0^{t_b} \sum_{j=1}^{m} \frac{N_j}{N_t} \exp\left\{ \frac{\beta}{kT} \left(\phi_j^\circ - \phi_{j+\frac{1}{2}}^\circ \right) \right\} dt_b$$

・・・・（4－ス4）

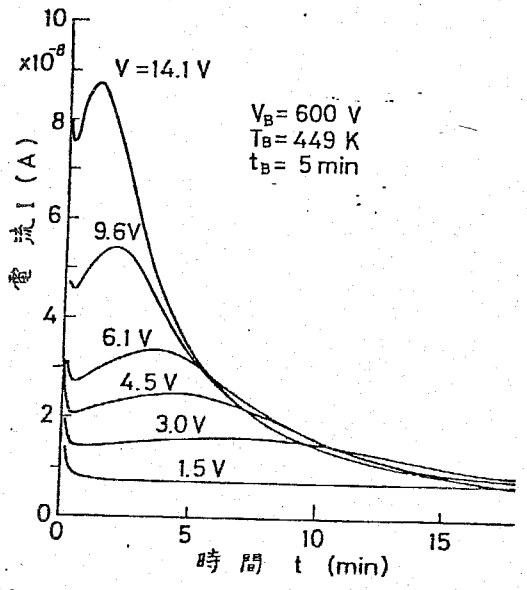
従って，$\ln Q \sim V$の直線関係が得られ，この傾斜からホッピング距離が求められる。実際に（4－ス3）式，または（4－9）式によって計算を行なった結果を第4－13図に示す。これは$d = 1,000$ Å，$l = 20$ Åとして求めたものであるが，印加電圧Vが大きくなると，$\ln Q \sim V$の直線関係が示されている。時間t_bが大きくなると直線の傾斜は増加しているが，イオンが一つのポテンシャルの山を越える時間に相当する比較的初期の$t_b = 1.0$での傾斜からlを求めてみると$l = 20.4$ Åとなり，ホッピング距離がほぼ正しく求められていることがわかる。（4－17）式により試料が厚くなり，ポテンシャルの山の数が多い場合を等価計算しても，これを正しく決定できる。第4－13図中にそう入した$\ln Q \sim V$の特性は，PET試料で，バイアス時間$t_B = 15$ secを用いて得られたものである。直線部分の傾斜より（4－ス4）式を用いて$l = 180$ Åが得られた。(32)



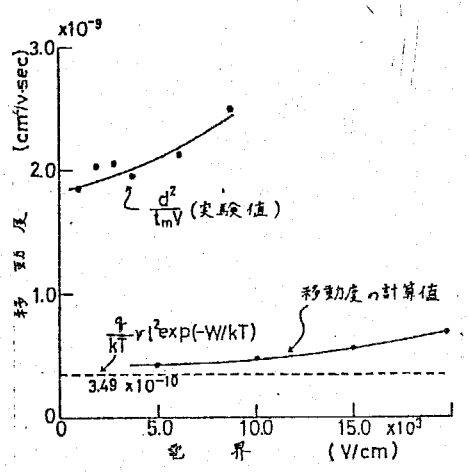
第4－13図　分極量と電圧の関係の時間特性

第4－14図は厚さ16 μmのPET試料について，バイアス温度$T_B = 449$ Kでバイアス電圧$V_B = 600$ Vを時間$t_B = 5$ minを印加した後，各種反転電圧を加えて温度449 Kで測定した過渡電流特性を示している。同図より電流にピークを生じることがわかる。

従来から印加電圧極性反転で見られる電流ピークの発生する時間t_mを荷電粒子の電極間走行時間として，その移動度μを印加電圧V，試料の厚さ，つまり電極間距離dを用いて$\mu = d^2 / t_m V$から求めている。(34) しかし，第4－8図



第4－14図　イオン過渡電流の測定例（PET, $t_B = 5$ min, $T_B = 449$ K, $V_B = 600$ V）



第4－15図　PET試料についての移動度の評価

に示したように荷電粒子の等動はかなり複雑であって，この式の物理的意味は不明確な感がある。第2章で示したように，ホッピングモデルではイオンの移動度は基本的には $(q/kT)\nu l^2 \exp(-W/kT)$ になる。そして，一般に移動度はこの値に電界依存性を知るには，第4－11，12図に示した空間電荷電界の効果を除いた計算によるのがよい。つまり，第4－11図のような電荷密度のピークの位置では電荷の濃度に勾配はなく，電荷はドリフトによってのみ移動すると考えられるので，この電荷の移動は移動度の効果のみで行なわれる。従って，第4－12図のようにピーク位置の速度を求めれば，これからの移動度が求められる。第4－15図は，第4－14図の測定結果について，このように求めた移動度と $(q/kT)\nu l^2 \exp(-W/kT)$ の値を示してある。また実験から $\mu = d^2/t_m V$ によって算出された移動度も示した。

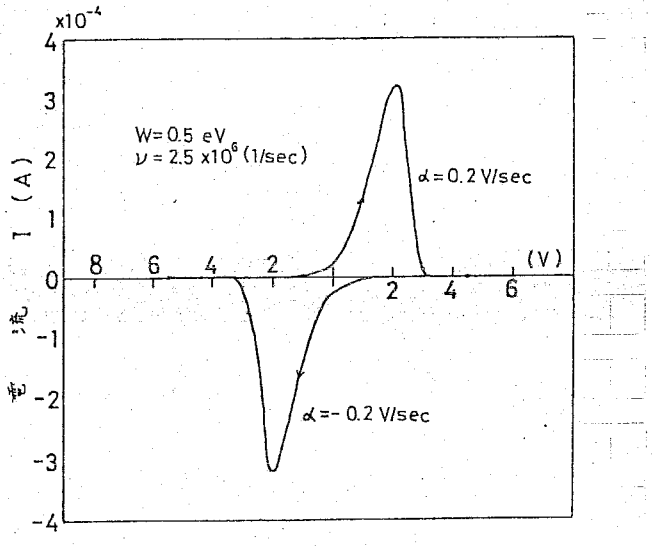
4－5　ホッピング数値計算法の他への応用[35)~37)]

<5－1> ramp電圧を印加する場合の扱い[35)~37)]

前節までに述べた数値解析は，いずれも試料にステップ電圧を印加した場合であるが，これ以外の電圧印加の場合も容易に（4－3）式を考慮して行なえる。例えば，試料にramp電圧を印加して電流波形を観測し，その電気的特性を評価する測定がMIS構造素子中の絶縁膜内でのキャリアの挙動を調べるために行なわれている。このようなramp電圧を印加する場合の解析は，（4－3）式中のVを，

$$V = V_0 + \alpha t \qquad \cdots\cdots (4-25)$$

として，（4－1）式の微分方程式を解くことによって行なうことができる。ただし，V_0は初期印加電圧，αは昇圧速度である。（4－25）式によって計算される電流波形の一例を第4－16図に示す。計算条件は図中に示したが，$V_b = -5.5$ Vで形成される試料内電荷分布を初期値とし，$\alpha = 0.2$ V/sec，$W = 0.5$ eV，$\nu = 2.5 \times 10^6$ 1/secとした。これらの値はMIS試料の測定で得られているものにほぼ合わせたものである。（第13章参照）同図より，2V付近で電流ピークを生ずることがわかる。また，電流が零となった後，4.5Vより逆に$\alpha = -0.2$ V/secなる速度で電圧を降下させた場合も図示したが，両者はほぼ対称な電流波形となる。以上のように電流波形はピークの発生を伴なうが，このことは試料内での電荷分布の動きと関連している。第13章では，この点についてもっと詳しく述べた。



第4－16図　ramp電圧に対する電流－時間特性

以上述べてきたように，本数値計算法は種々の電圧印加に対して

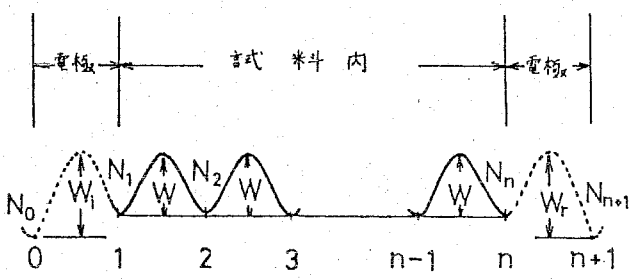
有効に適用できると考えられる。そして，第9章では交流電圧を印加する場合の扱いについて詳しく論じた。

<5-2> 界面現象を考慮した場合の扱かいについて

絶縁体において電極界面現象は，物理的に極めて興味深くかつ重要な問題である。例えば，最近では，PET試料やMIS試料についての高温度における電導現象が界面での電荷の中性化現象と関連しているとの報告がなされている。[100] このような電極界面における現象が，どのように電導と関係しているかは本数値計算法を用いれば容易にシミュレーションすることができる。そのためには電荷の挙動に対する一つのモデルを設定しなければならない。そして，設定したモデルに対する数値計算が容易に行なえるならば，種々の現象が解明されるものと期待できる。以下に一例を示すが，本数値計算法が上記のシミュレーションに対して有効である理由は，第2章でも述べたように方程式系が基本的に変化しないことによっている。

計算に用いたモデルは，第4-17図に示すように両電極界面にポテンシャルの山の高さがW_i，W_r，周波数因子がν_i，ν_rのトラップがあるとするものである。両電極面での差はMIS構造素子の絶縁膜の両端の差を考慮していることを意味する。両電極面におけるトラップの効果は図示したように，試料の外側に仮想的にW_i，W_r，なるポテンシャルの山があり，イオン伝導に寄与する井戸が両電極1つずつ増加すると考えればよい。このことは，(4-1)式で記述される伝導の基本方程式を次式のように変形して考えればよいことを意味している。

$$\frac{d}{dt}N_0 = -\omega_{0,1}N_0 + \omega_{1,0}N_1$$



第4-17図 界面現象を考慮したモデル

$$\frac{d}{dt}N_j = \omega_{j-1,j}\,N_{j-1} - (\omega_{j,j-1}+\omega_{j,j+1})\,N_j + \omega_{j+1,j}\,N_{j+1}$$

$$(j = 1, 2, \cdots, n)$$

$$\frac{d}{dt}N_{n+1} = \omega_{n,n+1}\,N_n - \omega_{n+1,n}\,N_{n+1}$$

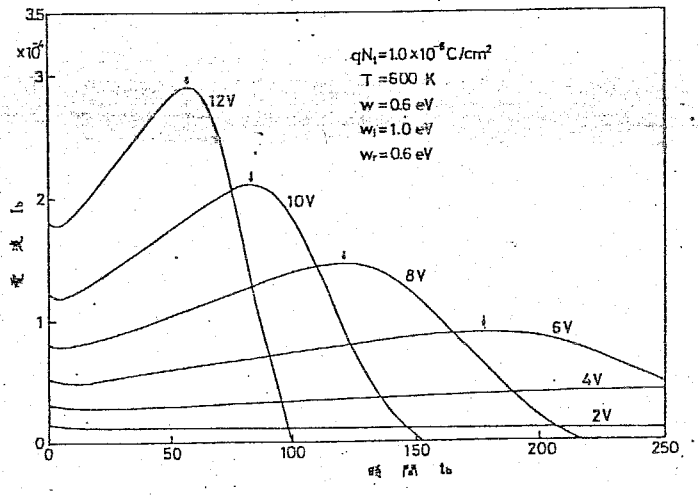
$$\cdots\cdots(4-26)$$

ここで，N_0，N_{n+1}はトラップに存在するイオンである。（4－26）式と（4－1）式を比較すれば明らかなように，（4－26）式は（4－1）式に$j=0$，$n+1$で示される項が付加されたのみで方程式の形は実質上変化していない。ただし，（4－26）式では電極面におけるトラップの効果は，次式のように$\omega_{0,1}$，$\omega_{n+1,n}$なるトラップからバルクへの遷移確率を表示することで含まれている。

$$\left.\begin{aligned}\omega_{0,1} &= \nu_i \exp(-W_i/kT)\\ W_{n+1,n} &= \nu_r \exp(-W_r/kT)\end{aligned}\right\}\cdots\cdots(4-27)$$

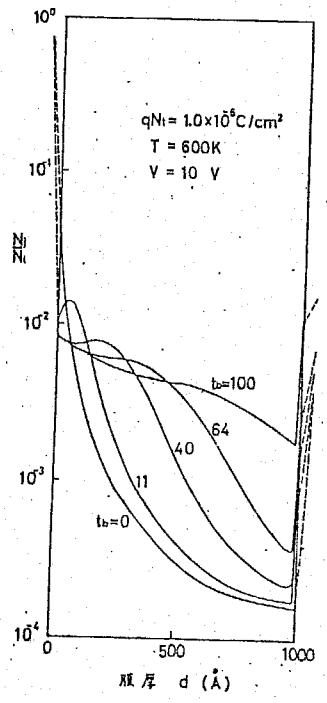
また（4－27）式より，このモデルではトラップより電荷がバルクへ流れ出る際には空間電荷電界の効果は入らないことも仮定されている。

さて，上記のモデルを用いて数値解析を行なった計算例を第4－18図に示す。計算条件は第4－4図の計算例と同じで，試料内の全電荷量qN_tを$1.0\times10^{-6}\,C/cm^2$とした。また，初期分布は第4－19図の$t_b=0$で示される平衡分布とし，ν，ν_i，ν_rは，それ



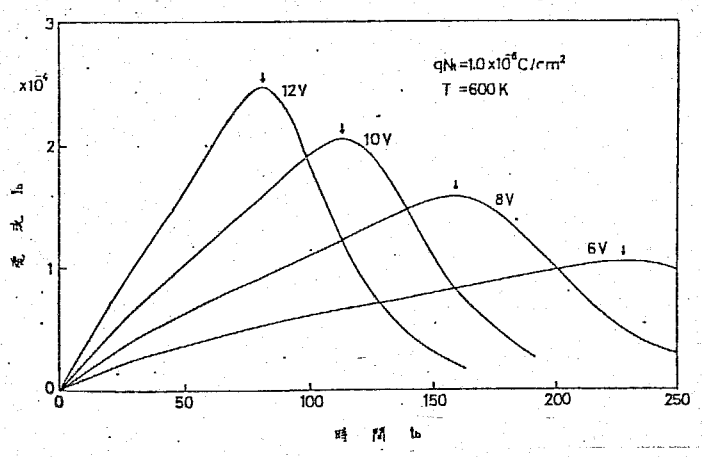
第4－18図　過渡電流特性の計算例

それ$\nu = 1.0\times10^5$, $\nu_i = 1.0\times10^7$, $\nu_r = 1.0\times10^5$ (1/sec) なる値が選らばれている。電流-時間特性は第4-18図に示された通りであり, 第4-4図と比較すれば初期電流特性に急激な電流の減少がみられないこと及びピーク発生以後の電流特性はなだらかな減少を示す点に特徴がある。これらは勿論, 界面の特殊な条件を考えたためであり興味深い。また図中には第4-8図のように電荷分布の先端が対向電極に到達する時間を矢印で記したが, この時間はちょうど電流ピークの発生する時に対応しており, 結果は第4-4図の場合と変わりない。また, このような条件での荷電粒子の挙動は第4-19図に示される通りで, 結果は第4-8図の場合とほとんど変わりないが異面付近で若干の差異がみられている。



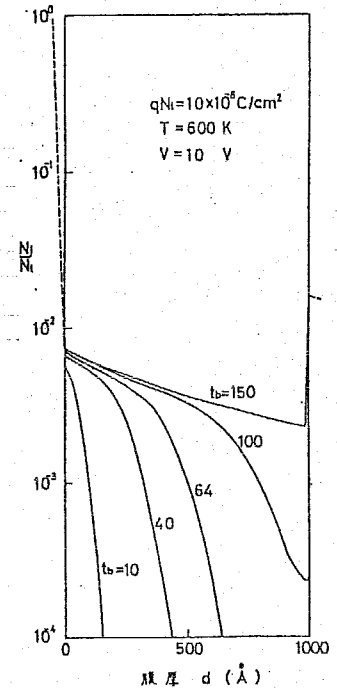
第4-19図 試料内における荷電粒子の挙動

第4-20図は0番目の井戸, すなわち一方



第4-20図 電極界面でイオンが完全に中性化している場合の電流-時間特性

第4-21図 第4-20図に対する試料内における荷電粒子の挙動



の電極面で完全にイオンが中性化している場合について過渡電流を計算したものである。初期電流特性は電流値零からの立ち上がり特性となり，第4－4図の場合と比較すれば非常に異なっている。第4－21図はその場合の試料内での荷電粒子の挙動を示しているが，第4－19図と比較すれば大差はない。電荷分布の先端が対向電極に到達する時間も第4－20図中に記したが，電流ピーク発生時間とほぼ一致しており第4－18図の結果と同じである。

以上のようにホッピング数値計算法によれば，界面における特殊な現象を容易に基本方程式系に代入して解析することができる。また，それ以外の現象も方程式に代入することは容易である。この点については，第14章で半導体を例にとり詳しく論じた。上記のように数値解析が容易に行なえる理由は，基本方程式に特殊な条件を代入してもその基本的構造が変化しないためであろう。このことは数値解析をより一層扱かいやすいものとしている。また，これは数値解析によるシミュレーションにとって最も基本的で重要なことであると考えられる。

4－6　まとめ

本章では，可動イオンによる過渡電流やその空間電荷の変動過程をホッピング数値計算法で解析する方法を示した。その結果，過渡電流にピーク値の発生すること，ピークの発生は過剰電荷が存在して，これが空間電荷電界を形成しているときに限られることが明らかとなった。また，過渡電流はホッピング距離により大きく変化するが，距離に関する簡単な変換を電流と時間に施すことにより電流－時間特性を重ね合せることができることが示された。そして，この相似性と実験値を用いることでホッピング距離や可動イオンの移動度を評価する新しい方法も明らかにされた。更にイオン伝導過程における複雑なイオンの動きも知ることができた。その他，界面現象を含む場合にも適用されることも示した。

第 5 章　誘電体における空間電荷分極電流の取扱いと印加電圧極性反転電流に関する研究

5-1 まえがき

前章までに，ポアソンの式で定められる電界のもとで可動イオンのドリフトと拡散によって生ずる空間電荷分極電流を理論解析することは困難であるが，ホッピング数値計算法によれば扱かえることを示した。しかし，数値解析に用いられたホッピングの基本式はポアソンの式及びドリフトと拡散の電流式と等価であり，空間の不連続な位置にあるポテンシャル井戸の諸量で記述されるものであるから，その取扱いも容易な面がある。そこで本章では，この基本式によって誘電体中の可動イオンによる空間電荷分極電流の解析が試みられる。ここに示される解析には近似が用いられており，勿論厳密な理論解析ではないが，ポリエチレンテレフタレート（ＰＥＴ）の印加電圧極性反転電流にみられる特性を理解でき[38)~(39)]，仮想平衡電圧の考え方によって空間電荷分極の緩和時間も導入される。

5-2 解析

<5-2-1> ホッピングモデルとその基本式

ホッピングモデルは第3章ですでに述べられているので説明を省くが，本章では第3章の（i）～（iv）の仮定に次の条件が付加されている。

（v）ホッピング距離は非常に小さく，無限小となる極限を考える。

すなわち，ホッピングの基本式がポアソンの式及び拡散とドリフトの電流式に等価となることを示している。以下に，後の議論の都合上，第3，4章の解析の基本式を簡単に整理する。ポテンシャルを表わす式は，

$$-\phi_j + \phi_{j+\frac{1}{2}} = -A_j^n(N_j) + B_{j+1}^n(N_j) + \frac{V}{2(n-1)}$$

ただし，

$$A_1^n(N_j)=\frac{8l^2}{2d\varepsilon}\sum_{j=1}^{n}(j-1)N_j\ ,\quad B_{j+1}^n(N_j)=\frac{8l^2}{2d\varepsilon}(n-1)\sum_{j=j+1}^{n}N_j$$

・・・・・(5－1)

外部回路に流れる電流は分極量の時間変化として得られ，

$$I_b(t_b)=\frac{8l}{d}\sum_{j=1}^{n}(j-1)\frac{dN_j}{dt_b}$$

・・・・・(5－2)

ただし，$I_b(t_b)$，t_b は実際の電流 $I(t)$ 及び時間 t を $I_b=I/\nu\exp(-w/kT)$，$t_b=t\nu\exp(-w/kT)$ で変換している。

また，(ν) の条件よりポテンシャル井戸間の遷移確率を指数関数の展開一次項とすることができるので，井戸のイオン数の時間変化は，

$$\frac{d}{dt}N_j=\left\{1+\frac{8}{kT}(\phi_{j-1}-\phi_{j-\frac{1}{2}})\right\}N_{j-1}-\left\{1-\frac{8}{kT}(\phi_{j-1}-\phi_{j-\frac{1}{2}})\right\}N_j$$
$$-\left\{1+\frac{8}{kT}(\phi_j-\phi_{j+\frac{1}{2}})\right\}N_j+\left\{1+\frac{8}{kT}(\phi_j-\phi_{j+\frac{1}{2}})\right\}N_{j+1}$$

・・・・・(5－3)

<5－2－2> 仮想平衡電圧

最初にある電圧 V_0 による N_j の平衡分布が生じているとき，V_0 と極性の異なる電圧 V を印加した場合の分布の時間変化を考える。これは，一般に(5－3)式に(5－1)式を用いて次のように表わされる。

$$\frac{d}{dt}N_j=\left[1+\frac{8}{kT}\left\{-A_1^n(N_j)+B_j^n(N_j)+\frac{V_0}{2(n-1)}\right\}\right]N_{j-1}$$
$$-\left[1-\frac{8}{kT}\left\{-A_1^n(N_j)+B_j^n(N_j)+\frac{V_0}{2(n-1)}\right\}\right]N_j$$
$$-\left[1-\frac{8}{kT}\left\{-A_1^n(N_j)+B_{j+1}^n(N_j)+\frac{V_0}{2(n-1)}\right\}\right]N_j$$
$$+\left[1-\frac{8}{kT}\left\{-A_1^n(N_j)+B_{j+1}^n(N_j)+\frac{V_0}{2(n-1)}\right\}\right]N_{j+1}$$

$$+\frac{q}{kT}\frac{V-V_0}{2(n-1)}(N_{j-1}-N_{j+1})$$

$\cdots\cdots(5-4)$

イオンの初期分布はV_0によって平衡しているので，（5－4）式の右辺第1項と第2項及び第3項と第4項は互に打消し合って零となり，N_jの初期変化速度は次のようになる。

$$\left.\frac{d}{dt}N_1\right)_{t_b=0}=-\frac{q}{kT}\frac{V-V_0}{2(n-1)}(N_1+N_2)$$

$$\left.\frac{d}{dt}N_j\right)_{t_b=0}=\frac{q}{kT}\frac{V-V_0}{2(n-1)}(N_{j-1}-N_{j+1})$$

$(j=2,3,\cdots,n-1)$

$$\left.\frac{d}{dt}N_m\right)_{t_b=0}=\frac{q}{kT}\frac{V-V_0}{2(n-1)}(N_{n-1}+N_n)$$

$\cdots\cdots(5-5)$

ただし，上式$j=1,n$での関係式はブロッキングの条件から得られる。

次に微小時間dt_b経過したときのイオン数はN_j+dN_jとなるが，このときもjと$j+1$の各井戸間に適当に$v_j/(n-1)$なる電位差を与えれば，この間のイオンの遷移は平衡した状態とみることができる。そして，次の平衡条件が成立する。

$$\frac{q}{kT}\left\{-A_1^n(N_j+dN_j)+B_{j+1}^n(N_j+dN_j)+\frac{v_j}{2(n-1)}\right\}$$

$$=\frac{(N_{j+1}+dN_{j+1})-(N_j+dN_j)}{(N_{j+1}+dN_{j+1})+(N_j+dN_j)}$$

$\cdots\cdots(5-6)$

最初はV_bによる平衡分布となっているので，

$$\frac{q}{kT}\left\{-A_1^n(N_j)+B_{j+1}^n(N_j)+\frac{V_0}{2(n-1)}\right\}$$

$$= \frac{N_{j+1} - N_j}{N_{j+1} + N_j} \qquad \cdots\cdots (5-7)$$

(5-6)式と(5-7)式の辺々を差引くと,

$$\frac{g}{kT}\left\{-A_1^n(dN_j) + B_{j+1}^n(dN_j) + \frac{v_j - V_0}{z(n-1)}\right\}$$

$$= \frac{(N_{j+1} + dN_{j+1}) - (N_j + dN_j)}{(N_{j+1} + dN_{j+1}) + (N_j + dN_j)} - \frac{N_{j+1} - N_j}{N_{j+1} + N_j}$$

$$\cdots\cdots (5-8)$$

ここで分布変化 dN_j が(5-5)式に従うものとし, 隣接井戸間が極めて接近していることから, この微小区間で N_j の直線変化を仮定し, dN_j が N_j に対して十分小さいとする。つまり, 次式の条件を用いる。

$$N_{j+2} - N_{j+1} \fallingdotseq N_{j+1} - N_j \fallingdotseq N_j - N_{j-1}, \quad dN_{j+1} = dN_j$$

$$1\Big/\left(1 + \frac{dN_{j+1} + dN_j}{N_{j+1} + N_j}\right) \fallingdotseq 1 - \frac{dN_{j+1} + dN_j}{N_{j+1} + N_j}$$

$$\cdots\cdots (5-9)$$

(5-5), (5-9)式より(5-8)式は次のように書ける。

$$\frac{g}{kT}\left\{-A_1^n(N_{j-1} - N_{j+1}) + B_{j+1}^n(N_{j-1} - N_{j+1}) + \frac{v_j - V_0}{z(n-1)}\Big/\frac{g}{kT}\frac{V - V_0}{z(n-1)}\right\}$$

$$= \left\{\frac{z(N_{j+1} - N_j)}{N_{j+1} + N_j}\right\}^2 \qquad \cdots\cdots (5-10)$$

一方, 最初は V_0 による平衡分布が生じているので, $j-1$ と j 及び $j+1$ と $j+2$ の各井戸間で次式が成り立つ。

$$\frac{g}{kT}\left\{-A_1^n(N_j) + B_j^n(N_j) + \frac{V_0}{z(n-1)}\right\} = \frac{N_j - N_{j-1}}{N_j + N_{j-1}}$$

$$\cdots\cdots (5-11)$$

$$\frac{g}{kT}\left\{-A_1^n(N_j) + B_{j+2}^n(N_j) + \frac{V_0}{z(n-1)}\right\} = \frac{N_{j+2} - N_{j+1}}{N_{j+2} + N_{j+1}}$$

・・・・・(5-12)

上の2式を辺々差引いて，さらに(5-1)式を参照すれば，

$$\frac{q}{kT} B_{j+1}^{n} (N_{j-1} - N_{j+1}) = \frac{N_j - N_{j-1}}{N_j + N_{j-1}} - \frac{N_{j+2} - N_{j+1}}{N_{j+2} + N_{j+1}}$$

・・・・・(5-13)

ここで(5-9)式のようにN_jの直線変化を仮定し，また$(N_{j+1} + N_j) \gg 2(N_{j+1} - N_j)$として，(5-9)式の3番目の式と同じ近似をすると，(5-13)式は，

$$\frac{q}{kT} B_{j+1}^{n} (N_{j-1} - N_{j+1}) = \left\{ \frac{2(N_{j+1} - N_j)}{N_{j+1} + N_j} \right\}^2$$

・・・・・(5-14)

(5-10)式と(5-14)式より

$$\frac{v_j - V_0}{2(n-1)} \Big/ \frac{q}{kT} \frac{V - V_0}{2(n-1)} = A_1^n (N_{j-1} - N_{j+1})$$

・・・・・(5-15)

上式の右辺は井戸の位置jには関係しない量である。よって，dt_b後の分布変化に対する仮想の平衡電位差$v_j/(n-1)$も井戸の位置によらずほぼ同じである。ただし，1とあるいは$n-1$とnの井戸間の電位差$v_1/(n-1)$と$v_n/(n-1)$については上記のような議論はできないが，これも次のように考えることができる。

試料内の全イオン数N_tは一定であるから，前記v_jをvとすると

$$\frac{d}{dt_b}(N_1 + N_n) = -\frac{d}{dt_b}\left(\sum_{j=2}^{n-1} N_j\right)$$

$$= -\frac{q}{kT} \frac{V - v}{2(n-1)} \sum_{j=2}^{n-1} (N_{j-1} - N_{j+1})$$

$$= -\frac{q}{kT} \frac{V - v}{2(n-1)} (N_1 + N_2 - N_{n-1} - N_n)$$

・・・・・(5-16)

始めにV_bによって，$N_1 > N_2 > \cdots > N_n$なる分布になっていたとすると，$N_1 \gg N_n$とみられ，近似的に(5-16)式は，

$$\frac{d}{dt_b}N_1 = -\frac{g}{kT}\frac{V-v}{2(n-1)}(N_1+N_2)$$

・・・・・・(5-17)

一方，N_1とN_nの時間変化は，dt_b後において(5-5)式のV_0をv_1及びv_{n-1}に変えて示すことができ，さらに(5-17)式の関係を用いると

$$\frac{d}{dt_b}(N_1+N_n) = -\frac{g}{kT}\frac{V-v}{2(n-1)}(N_1+N_2) + \frac{g}{kT}\frac{V-v_{n-1}}{2(n-1)}(N_{n-1}+N_n)$$

・・・・・・(5-18)

(5-16)式と(5-18)式を比較して$v_{n-1} = v$とみられ，結局dt_b後も

$$\frac{d}{dt_b}N_1 = -\frac{g}{kT}\frac{V-v}{2(n-1)}(N_1+N_2)$$

$$\frac{d}{dt_b}N_j = \frac{g}{kT}\frac{V-v}{2(n-1)}(N_{j-1}-N_{j+1}) \quad (j=2,3,\cdots,n-1)$$

$$\frac{d}{dt_b}N_n = \frac{g}{kT}\frac{V-v}{2(n-1)}(N_{n-1}+N_n)$$

・・・・・・(5-19)

が近似的に成立すると考えられる。よって，その後も上式が成立してゆくものとして以後の解析を進める。このような電圧vは，実際には印加されていないが，出現した分布を平衡させるような仮想の印加電圧であり，これを「仮想平衡電圧」と呼ぶことにする。

次にυの時間特性を求める。任意の時間t_bにおける仮想平衡の条件から，

$$\frac{g}{kT}\left\{-A_1^n(N_j)+B_{j+1}^n(N_j)+\frac{\upsilon}{z(n-1)}\right\}$$

$$=\frac{N_{j+1}-N_j}{N_{j+1}+N_j} \qquad \cdots\cdots(5-20)$$

微少時間dt_b後にN_jとυがそれぞれN_j+dN_jとυ+dυになったとすれば，

$$\frac{g}{kT}\left\{-A_1^n(N_j+dN_j)+B_{j+1}^n(N_j+dN_j)+\frac{\upsilon+d\upsilon}{z(n-1)}\right\}$$

$$=\frac{(N_{j+1}+dN_{j+1})-(N_j+dN_j)}{(N_{j+1}+dN_{j+1})+(N_j+dN_j)}$$

$$\simeq\frac{N_{j+1}-N_j}{N_{j+1}+N_j}+\frac{dN_{j+1}-dN_j}{N_{j+1}+N_j} \qquad \cdots\cdots(5-21)$$

ただし，υに関する微分方程式を得る目的であるから，dN_jを微小の極限とみて，$N_{j+1}+N_j$に対して$dN_{j+1}+dN_j$を無視している。(5-20)式と(5-21)式の差をとり，上式のdN_jに(5-19)式を用いれば，

$$\frac{g}{kT}\left\{-A_1^n(N_{j-1}-N_{j+1})+B_{j+1}^n(N_{j-1}-N_{j+1})+\frac{kT}{g}\frac{d\upsilon}{(V-\upsilon)dt_b}\right\}$$

$$=\frac{(N_1-N_3)+(N_1+N_2)}{N_2+N_1} \qquad (j=1)$$

$$=\frac{(N_j-N_{j+2})-(N_{j-1}-N_{j+1})}{N_{j+1}+N_j} \qquad (j=2,3,\cdots,n-2)$$

$$=\frac{(N_{n-1}+N_n)-(N_{n+2}-N_n)}{N_{n+1}-N_n} \qquad (j=n-1)$$

$$\cdots\cdots(5-22)$$

$n-1$個の上式を辺々加えて，

$$\frac{q}{KT}\left\{-(n-1)A_1^n(N_{j-1}-N_{j+1})+\sum_{j=1}^{n-1}B_{j+1}^n(N_{j-1}-N_{j+1})\right.$$

$$\left.+\frac{KT}{q}(n-1)\frac{dv}{(V-v)dt_b}\right\}$$

$$=z+\int_{N_{n-1}}^{N_n}\frac{dN}{N}-\int_{N_m}^{N_2}\frac{dN}{N}=z+\ln\left(\frac{N_n\cdot N_1}{N_{n-1}\cdot N_2}\right)$$

・・・・・(5-23)

ただし，上式の右辺は各井戸が極めて接近しているとし，$N_{j+1}+N_j=2N$，$N_{j-1}-N_{j+1}=2dN$として積分形で計算した。そして，この値は井戸の接近によって零になるとみられ，また左辺の第1項及び第2項はそれぞれの和を計算すると等しく，互に打消しあって零となる。よって，vの時間変化を示す方程式は，

$$\frac{dv}{V-v}=\frac{z}{n-1}dt_b \qquad \cdots\cdots(5-24)$$

$t_b=0$の初期では，$V=V_0$であるから

$$V-v=(V-v_0)e^{-\frac{z}{n-1}t_b} \quad \cdots\cdots(5-25)$$

すなわち，上式が仮想平衡電圧vの時間特性である。なお，$t_b=\infty$ではv=Vとなり現実の状態と一致する。

<5-2-3>

前節に得られた結果から空間電荷分極電流を求めて分極の緩和時間を導く。電流$I_b(t_b)$は空間電荷分極P_bの時間変化であるが，(5-6)式からみてP_bは実際の分極Pとなり，(5-2)式に(5-19)，(5-25)式の関係を用いると，

$$\frac{dP_b}{dt_b}=\frac{dP}{dt_b}=I_b(t_b)$$

$$= \frac{\delta l}{d} z N_t \frac{g}{kT} \frac{V - V_0}{z(n-1)} e^{-\frac{z}{n-1} t_b} \left(1 - \frac{N_1}{2N_t} - \frac{N_n}{2N_t}\right)$$

・・・・・(5-26)

I_b, t_b は換算された電流および時間であるから，実際の電流および時間 t に戻し，さらに拡散定数 D と移動度 μ についての関係

$$\mu = \frac{g}{kT} D \quad , \quad D = \nu l^2 \exp\left(-\frac{W}{kT}\right) \cdots (5-27)$$

を用いると，

$$\frac{dP}{dt} = \frac{\frac{N_t}{d}(\delta l)^2 \frac{n-1}{2kT} \frac{V-V_0}{d}}{\frac{dl}{2D}} \cdot e^{-\frac{t}{\frac{dl}{2D}}} \left(1 - \frac{N_1}{2N_t} - \frac{N_n}{2N_t}\right)$$

・・・・・(5-28)

上式において，N_t / d は単位体積中のイオン数 N とみられ，δl は双極子能率 μ_p，$(V - V_0)/d$ を電界 E とすれば，

$$N = \frac{N_t}{d} \quad , \quad \mu_p = \delta l \quad , \quad \bar{E} = \frac{V - V_0}{d}$$

・・・・・(5-29)

さらに，$dl/2D$ を τ_i とし，

$$\tau_i = \frac{dl}{2D} = \frac{n-1}{2\nu \exp(-W/kT)} \cdots (5-30)$$

よって，(5-28) 式は

$$\frac{dP}{dt} = \frac{P_s}{\tau_i} e^{-t/\tau_i} \left(1 - \frac{N_1}{2N_t} - \frac{N_n}{2N_t}\right)$$

・・・・・(5-31)

ただし，

$$P_s = \frac{N \mu_p^2 \bar{E}}{2kT} (n-1) \quad \cdots (5-32)$$

とおいた。この P_s は $(n-1)$ を除けば双極子分極の飽和値の形である。

したがって（5－31）式は右辺括弧内を除けば，双極子と同じように緩和形の分極現象を示している。よって，τ_i を空間電荷分極の緩和時間とする。なお，イオンが相隣る井戸間のみで遷移するとすれば，Debye-model で考えた双極子の分極であり，そのときの緩和時間 τ_0 は，ほぼ

$$\tau_0 = \frac{1}{2\nu \exp(-W/kT)} \quad \cdots\cdots (5-33)$$

そして，τ_i と τ_0 の関係は，

$$\tau_i = (n-1)\tau_0 \quad \cdots\cdots (5-34)$$

以上述べたような結果は，空間電荷分極と双極子分極の対応関係をほぼ合理的に示していると思われる。すなわち，空間電荷分極の飽和値に当る P_s は双極子分極のそれぞれの $n-1$ 倍であるが，これはイオンの変位する距離が電極間距離であって，双極子の場合の距離 l の $n-1$ 倍となっているとみれば妥当なことである。また，（5－34）式に示すように緩和時間が $n-1$ 倍となっていることも同様にうなずける。しかし，（5－31）式に示すように $(1 - N_1/2N_t - N_n/2N_t)$ の項があり，N_1，N_n の時間変化の特性によって複雑な空間電荷分極電流が生じるものと考えられる。なお，τ_i が $n-1$ によることは，これが試料の厚さ d に関係することである。分極が可動イオンの電極間の移動によって生じるので，その緩和時間が電極間距離に依存することはむしろ自然である。すなわち τ_i は物質の性質と試料の形状によって定まる値と言えるであろう。（5－24）式中の N_1，N_n は電極界面のイオン濃度 ρ_0，ρ_d，平均濃度 $\bar{\rho}$ などを用いて，次のように示される。

$$\rho_0 = \frac{N_1}{l}, \quad \rho_d = \frac{N_n}{l}, \quad \bar{\rho} = \frac{N_t}{d} \quad \cdots (5-35)$$

よって，

$$\frac{N_1}{2N_t} = \frac{\rho_0}{2\bar{\rho}} \frac{1}{n-1} = \frac{D\tau_i}{d^2} \frac{\rho_0}{\bar{\rho}}$$

$$\frac{N_m}{2N_t} = \frac{D\tau_i}{d^2}\frac{\rho_d}{\bar{\rho}} \Bigg| \qquad \cdots\cdots (5-36)$$

これらの式を（5－31）式に用いて，

$$\frac{dP}{dt} = I(t) = \frac{P_s}{\tau_i} e^{-\frac{t}{\tau_i}} \left\{ 1 - \frac{D\tau_i}{d^2}\left(\frac{\rho_0}{\bar{\rho}} + \frac{\rho_d}{\bar{\rho}} \right) \right\}$$

$$= \mu E \bar{\rho}\, e^{-\frac{t}{\tau_i}} \left(1 - \frac{N_1}{2N_t} - \frac{N_n}{2N_t} \right) \qquad \cdots\cdots (5-37)$$

上式では，（5－29），（5－30）式を用いてP_s，τ_iをμ，E，$\bar{\rho}$に変換した。

ここで分極電流$I(t)$を定めるには，ρ_0，ρ_dまたはN_1，N_mの時間特性を知らねばならない。そこで，次節ではこれらの特性を近似的に求め，印加電圧極性反転電流の最大値を用いて分極特性を検討する。

5－3　印加電圧極性反転電流と分極特性

この節では，ポリエチレンテレフタレート（ＰＥＴ）に極性反転電圧を印加することによって生じる最大電流の特性から，空間電荷分極の緩和時間やイオンキャリアの移動度などを考察する。

<5－3－1>　最大電流の発生

前章でも述べたように，誘電体に極性反転電圧を印加した場合に，ある時点で電流が最大となる現象はよく知られていて，これが誘電体中のイオンキャリアの輸送によると考えられている。そこで，前節の結果をこの現象に適用するにあたり，隣接井戸が極めて接近しているとして，次のような近似をしてN_1，N_nの時間特性を定める。

$$N_1 \simeq N_2,\quad N_{n-1} \simeq N_n \qquad \cdots\cdots (5-38)$$

上式を（5－19）式に用いると，

$$\left.\begin{aligned}\frac{d}{dt_b}N_1 &= -\frac{g}{kT}\,\frac{V-v}{2(n-1)}\,2N_1\\ \frac{d}{dt_b}N_n &= \frac{g}{kT}\,\frac{V-v}{2(n-1)}\,2N_n\end{aligned}\right\} \quad \cdots(5-39)$$

上式のV－vに（5－21）式を用いて積分をすると，

$$\left.\begin{aligned}N_1 &= N_1^\circ e^{-\frac{g}{2kT}(V-V_0)}\left(1-e^{-\frac{2}{n-1}t_b}\right)\\ &\simeq N_1^\circ e^{-\frac{g}{kT}(V-V_0)\frac{2}{n-1}t_b} = N_1^\circ e^{-\frac{t}{\tau}}\\ N_n &= N_n^\circ e^{\frac{g}{2kT}(V-V_0)\frac{2}{n-1}t_b} = N_n^\circ e^{-\frac{t}{\tau}}\end{aligned}\right\}$$

$\cdots\cdots(5-40)$

ここでN_1°，N_n°はそれぞれ初期値であり，また$2t_b/(n-1)=t/\tau_i$が1よりかなり小さい範囲を取扱うものとして近似を用いている。そして，N_1，N_nの緩和時間とみられるτについては，次のような関係がある。

$$\tau = \frac{2kT}{g(V-V_0)}\cdot\frac{n-1}{2\nu\exp(-w/kT)}$$

$$= \frac{2kT}{g(V-V_0)}\tau_i \ll \tau_i \qquad \cdots\cdots(5-41)$$

（5－41）式の関係は，後に示すPET試料の実験でもV≒1.5～15Vであるから成立しているとみてよい。すなわち，（5－37）式に示す電流はτ_iよりはるかに小さい緩和時間τによって変化するN_1，N_nの特性で最大電流の発生する条件がほぼ決まるとみられる。つまり，N_1+N_nが最小となるところである。このことはN_1，N_n以外のキャリアすなわち試料中にあるキャリア数が最大となるところである。そして，その条件は，

$$\frac{d}{dt_b}(N_1+N_n)=0 \qquad \cdots\cdots(5-42)$$

(5－40)式を用いて上の条件を定めると,

$$N_{1m} = N_{nm} \quad \therefore \quad \frac{N_1^\circ}{N_n^\circ} = e^{\frac{2t_m}{\tau}} \quad \cdots (5-43)$$

ここでt_mは電流最大となる時間, N_{1m}, N_{nm} はそのときのN_1 , N_nの値である。一方, 初期イオン分布は電圧V_0によって平衡しているので, ドリフト電流と拡散電流の釣合いから,

$$\mu E \rho = D \frac{d\rho}{dx} , \quad \rho = \frac{N}{e} \quad \cdots (5-44)$$

上式を積分するときにV_0がVと逆極性であることを考慮して,

$$\frac{N_1^\circ}{N_n^\circ} = e^{\frac{e}{kT}(-V_0)} \quad \cdots (5-45)$$

(5－43), (5－45)式より

$$\frac{e}{kT}(-V_0) = \frac{2t_m}{\tau} \quad \cdots (5-46)$$

すなわち, (5－41)式にみられるようにては印加電圧Vによって変化するけれども, 電流最大となる時点では, (5－46)式が成立し, $2t_m/\tau$はVによらず一定である。このことは(5－40)式にみられるように, 初期値N_1° , N_n°が変わらなければ, N_1 , N_nの最大電流値N_{1m}, N_{nm}はVによらず一定となることを示している。そして, (5－37)式に示す電流が最大となるときは, その右辺の項$(1 - N_1/2N_t - N_n/2N_t)$は印加電圧によらずほぼ一定となる。

<5－3－2> 緩和時間と初期平衡電圧

前節で示した空間電荷分極の緩和時間τ_iと初期平衡電圧V_0を極性反転電流の実験結果より定めてみる。実験結果として, 前章の第4－14図を用いて電流最大値I_mと最大電流発生時間t_mの関係を整理すれば第5－1表のようになる。[32] I_mとt_mの関係は(5－37)式より

$$I_m = \mu E \rho \exp(-t_m/\tau_i) \cdot (1 - N_{1m}/2t - N_{nm}/2N_t)$$

・・・・(5-47)

V (v)	t_m (sec)	I_m (A)	$I_m.t_m$ (A.sec)
1.5	930	7.21×10^{-9}	6.71×10^{-6}
3.0	420	1.58×10^{-8}	6.64×10^{-6}
4.5	270	2.48×10^{-8}	6.70×10^{-6}
6.1	216	3.36×10^{-8}	7.26×10^{-6}
9.6	120	5.43×10^{-8}	6.52×10^{-6}
14.1	72	8.76×10^{-8}	6.31×10^{-6}

V ; reverse voltage

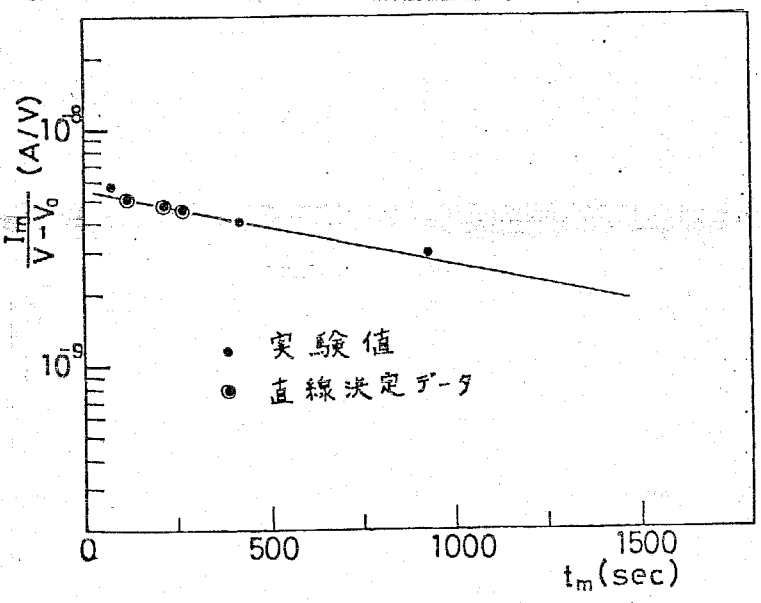
第5-1表
PET試料における t_m, I_m 及び $I_m \times t_m$ の測定値

上式の右辺括弧内は印加電圧Vによらず一定であるから，これをAとすると，

$$\frac{I_m}{V - V_0} = \frac{\mu \bar{\rho} A}{d} e^{-t_m/\tau_i} \quad \cdots\cdots (5-48)$$

μ, $\bar{\rho}$, A, dはすべて定数であるから，第5-1表の実測値を用いるとτ_iとV_0を決定できる。V = 9.6, 6.1, 4.5Vのデータで決定されたτ_iとV_0は，ほぼ次のような値であった。

$$\begin{cases} \tau_i = 1{,}200 \text{ sec} \\ V_0 = -0.9 \text{ V} \end{cases} \quad \cdots (5-49)$$



第5-1図 $I_m/(V - V_0) \sim t_m$ 特性

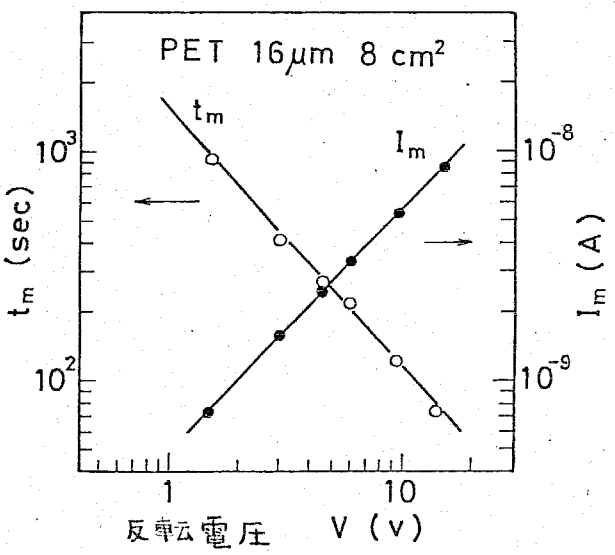
(5-48)式の対数をとり，$\ln(I_m/(V-V_0)) \sim t_m$ の直線を求めたのが第5-1図である。図中の3点は，(5-48)式のV_0とτ_iを求めたデータ

である。図示したように，その他の点もほぼ直線上にのっている。

実験では，初期印加電圧が－６００Ｖと大きいにかかわらず，$V_0 = -0.9$Ｖと小さいことは，－６００Ｖの印加は主としてイオンの発生にあずかっているものと考えられる。

<5－3－3> I_mとt_mの関係

第5－1表よりI_mとt_mの積を求めると反転電圧によらずほぼ一定であり，第5－2図に示すように，$\ln I_m \sim \ln V$や$\ln t_m \sim \ln V$も直線的な関係となる。[39] このような結果は以下のように説明される。すなわち，（5－46）式のτ_iを（5－41）式に用いると，



第5－2図 I_m，t_mと極性反転電圧Vとの諸特性

$$\frac{V - V_0}{} = \frac{(n-1)(-V_0)}{2 t_m \nu \exp(-W/kT)} \quad \cdots\cdots (5-50)$$

上式を（5－29）式の$E = (V - V_0)/d$に用いると，

$$I_m = \frac{(n-1)\mu \bar{p} (-V_0)}{2 t_m d \nu \exp(-W/kT)} e^{-\frac{t_m}{\tau_i}} \times \left(1 - \frac{N_{1m}}{2N_t} - \frac{N_{nm}}{2N_t}\right) \quad \cdots (5-51)$$

前節で得られたようにt_mはτ_iにくらべてかなり小さいので，$\exp(-t_m/\tau_i) \simeq 1$と近似すると，

$$I_m \times t_m = \frac{(n-1)\mu \bar{p} (-V_0)}{2 d \nu \exp(-W/kT)} \left(1 - \frac{N_{1m}}{2N_t} - \frac{N_{nm}}{2N_t}\right)$$

・・・・・(5-52)

上式の右辺は印加電圧Vに関係しないものであり，

$$I_m \cdot t_m = 一定 \qquad \cdots\cdots (5-53)$$

また，$V_0 = -0.9V$となったので，$|V_0| \ll V$とすれば，(5-50)式より，

$$\ln t_m = -\ln V + C \quad (C：定数) \qquad \cdots\cdots (5-54)$$

(5-53)，(5-54)式より

$$\ln I_m = \ln V + C' \quad (C'：定数) \qquad \cdots\cdots (5-55)$$

(5-53)～(5-55)式は実験結果を説明している。

<5-3-4> 移動度について

前章でも述べたように，キャリアの移動μ_aは印加電圧極性反転の実験より，

$$\mu_a = \frac{d^2}{V_r \cdot t_m} \qquad \cdots\cdots (5-56)$$

として求められるが，空間電荷電界の影響がある場合には(5-56)式で取扱うことは疑問である。

そこで，ドリフト電流を定める(5-28)式の移動度μを評価し，併わせて(5-56)式のμ_aとの関係を求めてみる。そのためにホッピング距離lが非常に小さいとして解析結果を適用する。(5-27)式と(5-30)式より，

$$\mu = \frac{q}{2kT}\frac{dl}{\tau_i} \qquad \cdots\cdots (5-57)$$

PET試料では，$d = 16\,\mu m$，$l = 180\,Å$，$\tau_i = 1$，$200\,sec$(T=449Kの場合)であったので，(5-57)式に代入すれば

$$\mu = 3.2 \times 10^{-11}\ cm^2/V \cdot sec \qquad \cdots\cdots (5-58)$$

V (v)	μ_a (cm^2/v·sec)	μ (cm^2/v·sec)	
		t_m	τ_i
1.5	1.80×10^{-9}	3.00×10^{-11}	3.20×10^{-11}
3.0	2.03×10^{-9}		
4.5	2.06×10^{-9}		
6.1	1.94×10^{-9}		
9.6	2.22×10^{-9}		
14.4	2.52×10^{-9}		

V : reverse voltage

第5－2表 PET試料中のイオンキャリアの移動度μ_aとμの値

第5－1図の最大電流発生時間t_mと印加電圧V_mによって（5－56）式より求めたμ_aの値を第5－2表に示してあるが，約2．$\times 10^{-9}$ $cm^2/V\cdot sec$であり（5－58）式とはかなりの差がある。

他方，μとμ_aの関係は次のように求められる。すなわち，（5－50）式に（5－30）式を用いて

$$\frac{V-V_0}{-V_0} = \frac{1}{t_m}\cdot\frac{n-1}{2\nu\exp(-W/kT)} = \frac{\tau_i}{t_m} \qquad \cdots\cdots(5-59)$$

上式のτ_iを（5－57）式に用いて，

$$\mu = \left(\frac{d^2}{Vt_m}\right)\frac{g}{2kT}\cdot\frac{V(-V_0)l}{d(V-V_0)} \qquad \cdots\cdots(5-60)$$

前と同様に，$|V_0| \ll V$として

$$\mu = \mu_a \frac{g}{2kT}\frac{(-V_0)l}{d} \qquad \cdots\cdots(5-61)$$

ただし，ここでは（5－56）式の関係を用いた。t_mの実験値より求めたμ_aの値を用いて（5－61）式からμを算出すると，

$$\mu = 3.0 \times 10^{-11}\ cm^2/V\cdot sec \quad \cdots\cdots (5-62)$$

t_iから求めた(5－58)式に示すμの値と(5－62)式とはほぼ一致している。しかし，μとμ_aとの差はこのPET試料では約2桁もあり，空間電荷電界の場ではμ_aがドリフト電流を定める移動度μを示しているかどうか疑問である。μが物質によって定まるとすれば，(5－61)式からみて，μ_aは試料の厚さd，初期平衡電圧V_0及びホッピング距離lによって変化するとみられる。また，μとμ_aとの関係は温度Tによって変わることになる。一方，(5－59)式をみれば，この式はV，V_0，t_m，t_iの間の関係を示しており，極性反転電圧Vと電流最大時間t_mによって定められるものは移動度と言うよりも，むしろ試料の形状にも関係する空間電荷分極の緩和時間t_iであると考えられる。

5－4　まとめ

本章では，可動イオンによる空間電荷分極電流を空間電荷によるポアソン電界を考慮し，拡散とドリフトで取扱った。使用した基本式は，一次元の数値解析の問題に用いたれ元連立形のホッピング数値計算法の基本式であるが，その際，仮想平衡電圧や空間電荷分極の緩和時間などの考え方を使用した。この解析は，勿論近似的であるが，なかでもホッピング距離が微小の極限となるような場合を考えており，このことは拡散とドリフトによるキャリアの輸送を意味していて，イオンの隣接井戸への遷移確率がポテンシャルの指数関数形でなく，展開一次近似で示されることが条件である。従って，現実に有限のホッピング距離を考えるときには，印加電圧が小さく，やはり一次近似が可能である場合に本解析が適用できるであろう。その意味でPET試料に比較的低い極性反転電圧を印加した場合のデータを検討したが，ある時点で最大電流の生じる理由が理解され，イオンキャリアによる空間電荷分極の緩和時間も求められた。また，最大電流に関する特性も証明された。

第6章　絶縁体中の電子伝導現象に対するホッピング数値計算法の応用

6-1　まえがき[17] [40]~[42]

絶縁体材料中の電子伝導では，ドリフト電流と拡散電流を考慮してポアソンの式で空間電荷電界を定めて解析するのが一般的方法であるが，これらをそのまま解くことは極めて困難で，多くの場合は一部の効果を無視して近似計算が行なわれている。[17]例えば，空間電荷制限電流（ＳＣＬＣ）の解析では，拡散の無視あるいは注入電極界面の電界を零として計算が展開されている。[40]~[42]しかし，このような近似が電導現象の解析に大きく影響を及ぼす場合もあるから，これらの効果を無視することなく計算することが重要である。

前章では，この種のイオン伝導現象の解析にホッピングモデルに基づいた数値計算法（ホッピング数値計算法）を用いる方法を示したが，本章ではこれを電子伝導現象に対して適用する。すなわち，ホッピングモデルの特性を示す関係式は，ホッピング距離を小さくした極限で上記のドリフト電流と拡散電流とで表示し，ポアソンの式で電界を示す関係式に一致する。従って，ホッピング数値計算法によって電子伝導現象の解析が行なえることになる。本章では，定常状態に限り，上記イオン伝導の解析に用いたホッピングモデルを拡張し，電子伝導の解析を行なうための基本的な関係式を導く。次いで，数値解析の応用例としてＳＣＬＣを計算し，ＳＣＬＣ特有の電流－電圧特性が得られること，トラップによる特性の変化や拡散を考慮したことによる空間電荷特性を示す。さらに，低密度ポリエチレンフィルム（ＬＤＰＥ）についての実測値を用いて注入電極界面電界の問題を検討する。

6-2　ホッピングモデルによるポアソンの式を考慮したドリフト電流の扱い

ここで示すホッピングモデルは，第6-1図に示すように電極面ではポテンシャルＷの山の頂上があるとする。これは，第2章3節でホッピングモデルを

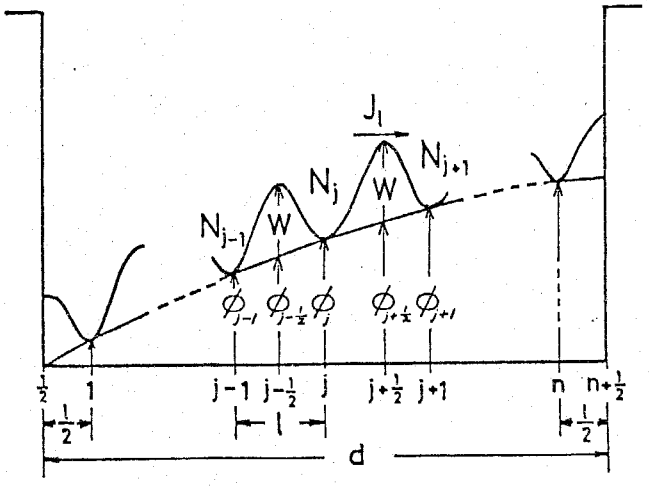
拡張した際の領域分割の考え方と関連している。そして，このようにすると電子伝導現象の境界条件などが非常に考え易くなる。

<6－2－1>　ホッピングとドリフト，拡散

第2章で述べた様に，ホッピングモデルによれば，第6－1図のj番目の井戸よりj＋1番目の井戸へ流れる局部電流J_ℓは，

$$J_\ell = \omega_{j,j+1}\,\delta N_j - \omega_{j+1,j}\,\delta N_{j+1} \qquad \cdots\cdots(6-1)$$

となるが，ホッピング距離ℓが小さい極限では次式で示される。



第6－1図　試料内の電位および荷電粒子の移動

$$J = \frac{\delta}{kT}\nu\ell^2 \exp\left(-\frac{W}{kT}\right)E\rho - \nu\ell^2 \exp\left(-\frac{W}{kT}\right)\frac{d\rho}{dx} \qquad \cdots\cdots(6-2)$$

そして，上式において，$\nu\ell^2\exp(-W/kT)$，$(\delta/kT)\cdot\nu\ell^2\exp(-W/kT)$を物質によって定まる拡散定数D，および移動度$\mu$と考えれば，

$$J = \mu E\rho - D\frac{d\rho}{dx} \qquad \cdots\cdots(6-3)$$

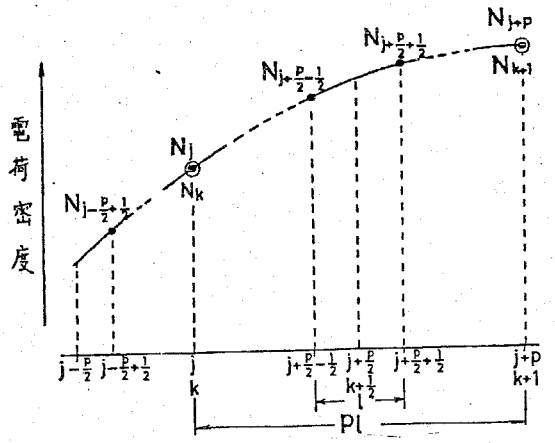
となり，ホッピング距離の小さい極限の状態はドリフトと拡散で電流を記述することと等価になることがわかる。ただし，このように考える時，ν，ℓ，Wなどの各々の値としての意味，つまりホッピングの概念はなくなるが，これらによって合成される$\nu\ell^2\exp(-W/kT)$の値などが意味を持つことになる。(6－3)式は正電荷の場合であるが，負電荷$-\rho$に対しても同様に次式が得られる。

$$J = \mu E\rho + D\frac{d\rho}{dx} \qquad \cdots\cdots(6-4)$$

<6-2-27 ポアソンの式に代わる電界の計算式

ここでは，ポアソンの式で表わされる電界を近似的に示すホッピング・モデルで数値計算の可能な式を考える。

ホッピング距離 l を非常に小さいとして，各井戸 j に存在する電荷がほとんど現実の連続分布と等しい場合と，距離を数値計算可能な pl と大きくとったときの各井戸 k の位置関係を第6-2図に示す。図中で，実線は試料内に実際に分布している電荷密度を表わし，N_j，N_k などはそれぞれの井戸にある粒子数で，●印は N_j を，○印は N_k を示す。なお，この図では p は奇数であるが，後に p の大きい極限を考えるのでこのようにおいてもさしつかえない。そこで，試料を等分した $k-1/2 \sim k+1/2$ の pl なる小区間で N_j と N_k の間に次のような関係があると仮定する。



第6-2図 ホッピング数値計算法による解析のための試料内電荷分布

(i) 各井戸の $g(N_j/l)$ および $g(N_k/pl)$ はその点の実際の電荷密度 ρ_j，ρ_k を表わす。

(ii) この区間での N_j の和は N_k に等しい。すなわち，

$$\sum_{i=j-\frac{p}{2}+\frac{1}{2}}^{j+\frac{p}{2}-\frac{1}{2}} N_i = N_k$$

(iii) 上式の両辺の粒子の持つ電荷によって試料内に作られる電位は同じである。

このような各井戸に置かれた粒子に関する仮定によって導かれる電界の計算式は，l を小さくしてゆくとポアソンの式に近づくものである。また，第6-2図で示される場合のポテンシャル ϕ_j は，

$$\phi_j = \frac{q\ell^2}{d\varepsilon}\left\{\left(n-j+\frac{1}{2}\right)\sum_{i=1}^{j}\left(i-\frac{1}{2}\right)N_i + \left(j-\frac{1}{2}\right)\sum_{i=j+1}^{n}\left(n-i+\frac{1}{2}\right)N_i\right\} + \frac{j-\frac{1}{2}}{n}V \quad \cdots\cdots (6-5)$$

ここで，Vは印加電圧で，nはポテンシャル井戸の数である。

電導の解析には試料内の電界が問題であり，従ってkと$k+1$の中間点の電界を（6－5）式から求めると，

$$-\frac{\phi_{j+P/2+1/2}-\phi_{j+P/2-1/2}}{\ell} = \frac{q}{d\varepsilon}\left\{\sum_{i=1}^{n}\left(i-\frac{1}{2}\right)\ell N_i - d\sum_{i=j+P/2+1/2}^{n}N_i\right\} - \frac{V}{d} \quad \cdots\cdots (6-6)$$

一方，N_kでkと$k+1$の間の電界を表わせば，（6－6）式と同様に

$$-\frac{\phi_{k+1}-\phi_k}{P\ell} = \frac{q}{d\varepsilon}\left\{\sum_{i'=1}^{n}\left(i'-\frac{1}{2}\right)P\ell N_{i'} - d\sum_{i'=k+1}^{n}N_{i'}\right\} - \frac{V}{d} \quad \cdots\cdots (6-7)$$

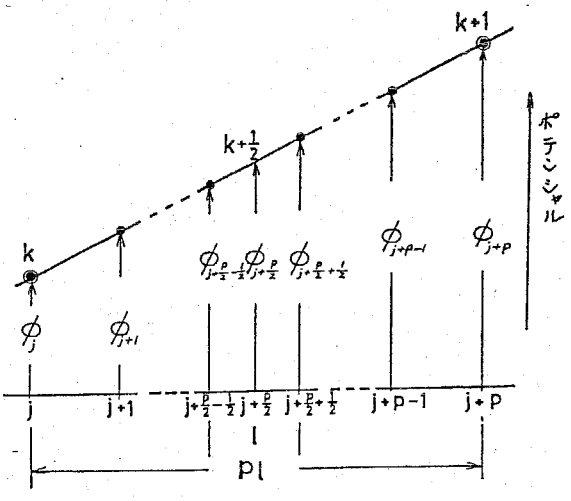
（6－6），（6－7）式の右辺括弧内の第1項は，これにqを乗ずれば共に試料内全電荷によって作られる電極間の電位差を示しており，上記の仮定（iii）より両者相等しい。また第2項は，$k+1/2$の位置より右方の電極までに存在する電荷に電極間距離dを乗じた量であって，仮定（ii）から両者相等しい。結局，$k+1/2$の点の電界を（6－7）式で計算することは（6－6）式の電界を求めることになる。ℓの微小のために（6－6）式がほとんどポアソンの式に等価であることを考えれば，（6－7）式で連続分布している電荷による試料内の電界を示すと考えられる。

<6－2－3>　ドリフト・拡散電流に代わる電流の計算式

電流は，第3章にも述べたようにホッピング距離ℓに大きく左右される。電

3電導現象はホッピング距離ℓを無限小としたときのホッピング電流と考えられたので，この電流を計算におけるホッピング距離$p\ell$で等価的に求める式を導く。

第6－3図にホッピング距離ℓと$p\ell$の場合の位置関係とポテンシャルを示す。ここでは，kとk＋1の試料内の小区間で次のような仮定をおく。



第6－3図　試料内ポテンシャルの直線近似

(i) kとk＋1の区間でϕ_j，ϕ_{j+1}，・・・，ϕ_{j+p}が直線的に変化する。

(ii) 上記の同じ区間でN_j，N_{j+1}，・・・，N_{j+p}も直線的に変化する。

(iii) 上記の区間で隣接する井戸$j+r$と$j+r+1$（$r=0,1,2,\cdots,p-1$）の間の電流はすべて等しいとし，これをJ_ℓとする。

(iv) 前節の仮定(i)で示したように，jとkの位置が同じとき$N_j/\ell = N_k/p\ell$とする。

仮定(iii)により，電流J_ℓはk＋1／2の中間点をはさむ隣接井戸$j+\frac{p}{2}-\frac{1}{2}$，$j+\frac{p}{2}+\frac{1}{2}$の間の電流として示すことができ，(6－1)式より

$$\frac{J_\ell}{\nu \exp(-w/kT)} = \exp\left\{-\frac{g}{kT}\left(\phi_{j+\frac{p}{2}}-\phi_{j+\frac{p}{2}-\frac{1}{2}}\right)\right\} g N_{j+\frac{p}{2}-\frac{1}{2}} - \exp\left\{-\frac{g}{kT}\left(\phi_{j+\frac{p}{2}}-\phi_{j+\frac{p}{2}+\frac{1}{2}}\right)\right\} g N_{j+\frac{p}{2}+\frac{1}{2}} \quad \cdots\cdots (6-8)$$

ℓが微小なるゆえ，(6－8)式の指数関数は一次近似することができ，

$$\frac{J_\ell}{\nu \exp(-w/kT)} = \left\{1-\frac{g}{kT}\left(\phi_{j+\frac{p}{2}}-\phi_{j+\frac{p}{2}-\frac{1}{2}}\right)\right\} g N_{j+\frac{p}{2}-\frac{1}{2}} - \left\{1-\frac{g}{kT}\left(\phi_{j+\frac{p}{2}}-\phi_{j+\frac{p}{2}+\frac{1}{2}}\right)\right\} g N_{j+\frac{p}{2}+\frac{1}{2}}$$

・・・・・(6－9)

ただし，遷移確率 $\omega_{j,j+1}$ に対しては前章の結果を代入している。

次に，仮定（i），（ii）および前節で得られた（6－6），（6－7）式の両者が等しいことを用いれば，

$$\left.\begin{aligned}\phi_{j+\frac{p}{2}} - \phi_{j+\frac{p}{2}-\frac{1}{2}} &= \frac{1}{p}\left(\phi_{k+\frac{1}{2}} - \phi_k\right)\\ \phi_{j+\frac{p}{2}} - \phi_{j+\frac{p}{2}+\frac{1}{2}} &= \frac{1}{p}\left(\phi_{k+\frac{1}{2}} - \phi_{k+1}\right)\end{aligned}\right\} \cdots (6-10)$$

$$\left.\begin{aligned}N_{j+\frac{p}{2}-\frac{1}{2}} &= N_j + \frac{N_{j+p}-N_j}{p}\,\frac{p-1}{2}\\ N_{j+\frac{p}{2}+\frac{1}{2}} &= N_{j+p} - \frac{N_{j+p}-N_j}{p}\,\frac{p-1}{2}\end{aligned}\right\} \cdots (6-11)$$

（6－10），（6－11）式を（6－9）式に用いると簡単な計算により，

$$\frac{J_\ell}{\nu \exp(-W/kT)} = \left\{\frac{1}{p} - \frac{1}{kT}\,\frac{\phi_{k+\frac{1}{2}}-\phi_k}{p}\right\} g N_j - \left\{\frac{1}{p} - \frac{1}{kT}\,\frac{\phi_{k+\frac{1}{2}}-\phi_{k+1}}{p}\right\} g N_{j+p} \quad \cdots\cdots (6-12)$$

さらに，j と k，j＋p と k＋1 の位置はそれぞれ一致しているので，仮定（iv）より

$$N_j = \frac{N_k}{p}, \quad N_{j+p} = \frac{N_{k+1}}{p} \quad \cdots\cdots (6-13)$$

（6－13）式を（6－12）式に用いて両辺を ℓ^2 で割ると，

$$\frac{J_\ell}{D} = \left\{\frac{1-(\phi_{k+\frac{1}{2}}-\phi_k)/kT}{p\ell}\right\} g\,\frac{N_k}{p\ell} - \left\{\frac{1-(\phi_{k+\frac{1}{2}}-\phi_{k+1})/kT}{p\ell}\right\} g\,\frac{N_{k+1}}{p\ell} \quad \cdots\cdots (6-14)$$

上式で ℓ を無限小とすれば，J_ℓ はドリフトと拡散による電流となることは＜6－2－1＞節で示したが，この場合には $p\ell$（$p \to \infty$）は一定に保たれる。

従って，（6－14）式はドリフト及び拡散電流からなるJ_ℓ / Dが，p_ℓなる有限の間隔を置いて存在する電荷N_kによって等価計算できることを示している。（6－14）式はホッピング数値計算法の重要な式であり，ホッピングの形式ではあるがドリフト，拡散電流を示している。そして，仮定（i）～（iv）を許す限り，いかなる厚さの試料，いかなる高電圧印加の場合にも成立するものである。

6－3　空間電荷制限電流の数値計算例

この節では，前節で示された電子伝導の数値解析法を空間電荷制限電流（SCLC）の計算に適用してみる。勿論，このように具体的な現象の計算では前節で導いた関係式を具体化し，更に境界条件などを定める式が必要となってくる。また，従来のSCLCでは無視されていた電子の拡散が，ここでは考慮されている。

<6－3－1>　SCLCの数値計算のための関係式

ここで取り上げるSCLCの計算では，伝導帯の下端および価電子帯の上端の準位がE_cとE_vであり，この間に浅い単一のトラップ準位E_tの存在する場合のバンド伝導を考える。また，フェルミ準位をE_Fとする。前節の（6－14）式に示したように，伝導帯で生じるドリフト・拡散電流は試料内にp_ℓの間隔で置かれた井戸の位置k（$k=1, 2, \cdots, m$）に自由電子，トラップ電子などが存在するとして計算される。更に，従来のSCLCの計算にならって注入電極面電界を零とする条件を置く。(17)

さて，上記のようなSCLC計算では次のような条件が成立している。まず，浅いトラップであるから，

$$E_c - E_t \gg kT, \quad E_t - E_F \gg kT \quad \cdots\cdots (6-15)$$

kの位置における伝導電子の数をN_k，トラップ電子の数をN_{tk}，トラップの数をN_{tmax}とする。ただし，N_{tmax}は電子のトラップされる場所の数であ

り，試料中どの位置でも一定である。（6－15）式の条件よりトラップに十分空席がある場合にはθを定数として，次の通常用いられる条件を置く。

$$\theta = N_k / N_{tk} \qquad \cdots\cdots (6-16)$$

そして，トラップが満たされ始めるとこの関係は成立しなくなるが，トラップが満ちるまでは成立するとして，

$$\left.\begin{aligned} &N_k / \theta > N_{tmax} \text{ ならば } N_{tk} = N_{tmax} \\ &N_k / \theta \leqq N_{tmax} \text{ ならば } N_{tk} = N_k / \theta \end{aligned}\right\} \qquad \cdots\cdots (6-17)$$

さらに，熱励起電子はどの場所でも一定でN_0とすると，電導にあずかる電子はN_kであるが，電位に寄与するのは$(N_k + N_{tk} - N_0)$である。また，注入電極面電界零の条件は，

$$\phi_1 - \phi_{\frac{1}{2}} = 0 \qquad \cdots\cdots (6-18)$$

である。

以上の諸条件を取り入れて，<6－2>節で求めた基本式から電位ϕ_k，電界E_kおよび外部回路電流Iを示す式を以下に導く。まず電位ϕ_kについては（6－5）式のN_kの代わりに$(N_k + N_{tk} - N_0)$を代入し，

$$\phi_k = -\frac{e(p\ell)^2}{d\varepsilon}\left\{\left(m-k+\frac{1}{2}\right)\sum_{i=1}^{k}\left(i-\frac{1}{2}\right)(N_i + N_{ti} - N_0)\right.$$
$$\left.+\left(k-\frac{1}{2}\right)\sum_{i=k+1}^{m}\left(m-i+\frac{1}{2}\right)(N_i + N_{ti} - N_0)\right\}$$
$$+\left(k-\frac{1}{2}\right)(p\ell)\frac{V}{d} \qquad \cdots\cdots (6-19)$$

ただし，電子の電荷を$-e$とし，$\rho = -e$と置いた。

さらに，電極面電界零の（6－18）式を（6－19）式に用いると，電極間印加電圧Vは，

$$V = -\frac{e(p\ell)}{\varepsilon}\sum_{i=1}^{m}\left(m-i+\frac{1}{2}\right)(N_i + N_{ti} - N_0)$$

・・・・・(6－20)

(6－20)式を(6－19)式に代入して

$$\phi_k = -\frac{e(p\ell)}{\varepsilon}\sum_{i=1}^{k}(i-k)(N_i + N_{ti} - N_0)$$

・・・・・(6－21)

これより,

$$\left.\begin{aligned}\phi_{k+\frac{1}{2}} - \phi_k &= \frac{e(p\ell)}{2\varepsilon}\sum_{i=1}^{k}(N_i + N_{ti} - N_0)\\ \phi_{k+\frac{1}{2}} - \phi_{k+1} &= -\frac{e(p\ell)}{2\varepsilon}\sum_{i=1}^{k}(N_i + N_{ti} - N_0)\end{aligned}\right\}$$

・・・・・(6－22)

電界E_kは, <6－2－3>節で与えた仮定(1)より$k \sim k+1$の間で一定であり, 次のようになる。

$$E_k = -\frac{\phi_{k+\frac{1}{2}} - \phi_k}{p\ell/2} = -\frac{e}{\varepsilon}\sum_{i=1}^{k}(N_i + N_{ti} - N_0)$$

・・・・・(6－23)

外部回路電流については定常電流を取扱っているので(6－14)式のJ_ℓとなるが, これをIと置き, 再び以下に記す。

$$\frac{I}{D} = \left\{\frac{1-(\phi_{k+\frac{1}{2}} - \phi_k)/kT}{p\ell}\right\}\frac{eN_k}{p\ell} - \left\{\frac{1-(\phi_{k+\frac{1}{2}} - \phi_{k+1})/kT}{p\ell}\right\}\frac{eN_{k+1}}{p\ell}$$

・・・・・(6－24)

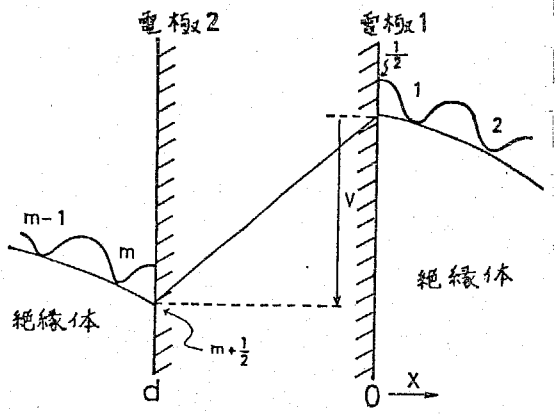
最後に外部回路を流れる電流についての境界条件を定めねばならない。これは第6－4図に示されるように, 電極1と電極2の間の外部回路を通して, $k=1$と$k=m$の位置の間に生じる電流である。まず図に示すような外部印加電圧Vが零であるとすれば, 両電極面つまり$k=1/2$と$k=m+1/2$の位置

の伝導帯下端のポテンシャルは同じとなり，試料内で与えられた（6－24）式と同様に次式が成立するであろう。

$$\frac{I}{D}=\frac{1-e(\phi_{m+\frac{1}{2}}-\phi_m)/kT}{P\ell}\cdot\frac{eN_m}{P\ell}$$

$$-\frac{1-e(\phi_{1-\frac{1}{2}}-\phi_1)/kT}{P\ell}\cdot\frac{eN_1}{P\ell}$$

・・・・・（6－25）



第6－4図　電子伝導の境界条件の説明図

上式の右辺の両項は，それぞれ位置mから位置1へ遷移する電子による電流と逆に1からmへの遷移による電流を示している。従って印加電圧Vが与えられたとき，mから1へ遷移する電子にとっては更に乗り越えるポテンシャルは発生しないが，逆の1からmへ遷移する電子はVなる電位障壁を乗越えねばならない。この電位による遷移確率の減少割合はボルツマン因子$\exp(-eV/kT)$によって与えられるから，（6－25）式の右辺第2項にこの因子を乗じて

$$\frac{I}{D}=\frac{1-e(\phi_{m+\frac{1}{2}}-\phi_m)/kT}{P\ell}\cdot\frac{eN_m}{P\ell}$$

$$-\frac{1-e(\phi_{\frac{1}{2}}-\phi_1)/kT}{P\ell}\exp\left(-\frac{eV}{kT}\right)\frac{eN_1}{P\ell}$$

・・・・・（6－26）

上式が境界条件を定める関係式である。

<6－3－2>　数値計算例

前節で導いた諸関係式を満たすように数値計算を行ない，試料中の電荷，電位，電界などの分布および電流－電圧特性を求めることができる。

まず，試料の分割数mを50とした。（6－16）式のθと熱励起電子数N_0はパラメータとして計算する。よって，自由電子数N_fを求めればトラップ電子数N_{tf}は，（6－16），（6－17）式よりθによって定められる。分布

を定めるには逐次計算法によった。すなわち，N_1 の値を設定して（6－22）式より（$\phi_{1+\frac{1}{2}}-\phi_1$），（$\phi_{1+\frac{1}{2}}-\phi_2$）を決め，与えられたI/Dの値に対して（6－22），（6－24）式を逐次用いて N_1，N_2，・・・，N_m の一連の値を求める。これらの値が（6－20）式と（6－26）式を満たすとき，これが解となる。従って，N_1 とI/Dの設定値を変えて計算を繰返して解を求める。その結果I/D～V特性が定まり，N_1，・・・，N_m が決定しているので各部の電位は（6－19）式より定まり，電界は（6－23）式より与えられる。

以下これらの計算結果を示すが，厚さの異なる場合にも計算結果が適用できるように試料内の位置 k を厚さ d と座標 x で（x/d）のように規格化し，諸量を以下のように示す。

$$\frac{x}{d}=\frac{Pl\cdot k}{d}=\frac{k}{m} \qquad \cdots\cdots(6-27)$$

$$\tilde{N}(x/d)=dN_k/\varepsilon_s m \qquad \cdots\cdots(6-28)$$

$$\tilde{N}_t(x/d)=dN_{tk}/\varepsilon_s m \qquad \cdots\cdots(6-29)$$

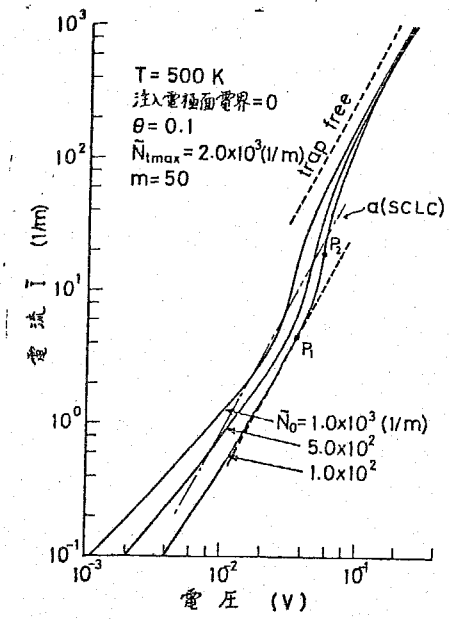
$$\tilde{N}_0=dN_0/\varepsilon_s m=\text{Const} \qquad \cdots\cdots(6-30)$$

$$\tilde{N}_{tmax}=dN_{tmax}/\varepsilon_s m \qquad \cdots\cdots(6-31)$$

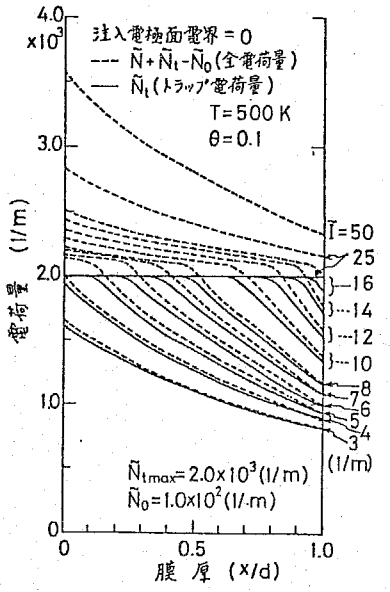
$$\tilde{I}=Id^3/e\varepsilon_s D m^3 \qquad \cdots\cdots(6-32)$$

ただし，ε_s は試料の比誘電率である。また，印加電圧V，試料内の電位 $\phi(x/d)$ はボルトの単位で示され，電界Eも（6－23）式に示されるようにV/cmの単位となっている。

第6－5図は，$\theta=0.1$，$\tilde{N}_{tmax}=2.0\times10^3\ m^{-1}$，$m=50$ と $\tilde{N}_0$ をパラメータとして計算された電流－電圧特性である。低電界のオーミック特性から2乗特性へ移る特性電圧はあまり明確にはわからない。更に電流の急増する特性も現われ，これは第6－6図で説明するようにトラップが満たされてゆく状態に対応している。そして，トラップが満たされた後も電流はかなり急増を続け，トラップのない場合の2乗特性に漸近してゆく。すなわち，第



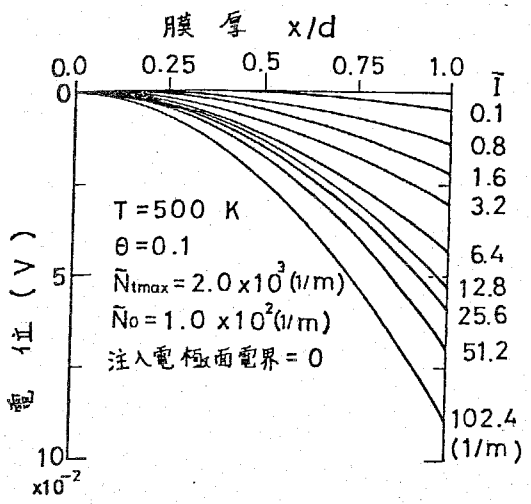
第6－5図　ＳＣＬＣの電流－電圧特性の計算例



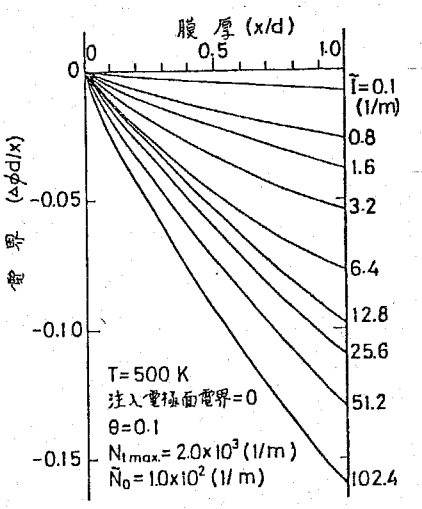
第6－6図　ＳＣＬＣにおける電荷分布の計算例

6－5図のｔｒａｐ　ｆｒｅｅとあるのがその２乗特性で，これは$\tilde{N}_t$と$\tilde{N}_0$を無視し，自由電子$\tilde{N}$のみとして計算されたものである。なお，αの２乗特性は拡散と$\tilde{N}_0$を無視して得られた従来のＳＣＬＣの計算結果を示しており，本数値計算による結果とそれほど違っていない。

第6－6図は第6－5図の$\tilde{N}_0 = 1.0\times10^2\ m^{-1}$の特性の場合の各電流レベルに対する電荷の分布を示したもので，実線がトラップ電子$\tilde{N}_t$，点線は$\tilde{N}+\tilde{N}_t-\tilde{N}_0$，つまり空間電荷に対応するものである。$\tilde{I}=4.0\ m^{-1}$より少し大きい所で，まず注入電極近辺のトラップが満たされ始め，この点は第6－5図のＰ₁点にあたる。次いで電流の増加，つまり電圧の上昇につれて順次内部のトラップが満たされてゆき，$\tilde{I}=16\ m^{-1}$より少し大きな所で全トラップが満ちる。この点は，第6－5図のＰ₂点にあたる。このように，トラップの満たされる場合のかなり複雑な空間電荷の変動も容易にわかるのが本数値計算法の特長であるが，従来のＳＣＬＣではこの分布を求めるのが非常に困難である。

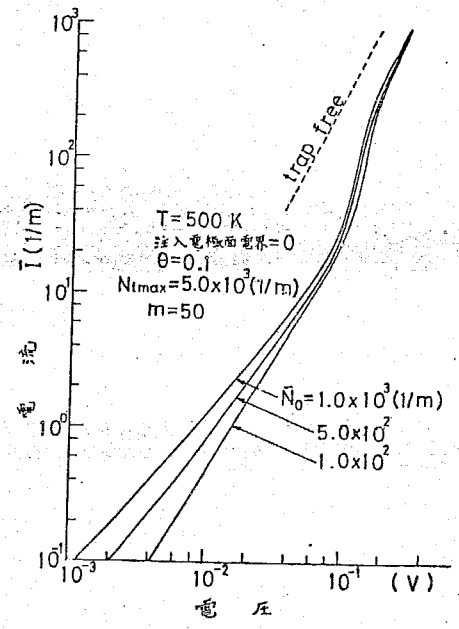


第6－7図　SCLCの電位分布の計算例



第6－8図　SCLCの電界分布の計算例

第6－7図，第6－8図は電位および電界の分布の計算例である。第6－9図は，第6－5図の場合に比べてトラップ密度だけを，$\tilde{N}_{tmax} = 5.0 \times 10^{3}\ m^{-1}$ と変えて計算したものである。第6－5図の計算例に比べて $\tilde{N}_{tmax}$ をえ．5倍にしてあるが，トラップの満ち始める電流急増の電圧がえ．5倍以上に上昇している。



第6－9図　SCLCの電流－電圧特性の計算例（トラップ密度を変えた場合）

以上数値計算例を示したが，この計算に用いた主な近似は，＜6－2－2＞，＜6－2－3＞節で示された条件である。これらは，いずれも局所線形化の近似であって，試料を分割した小区間におけるもので，数値計算で通常行なわれているものである。実際の計算は $m = 50$ としたが，分割数が多ければ近似はもっとよくなると考えられる。

6－4　注入電極面電界零の条件について

本数値計算では，従来のＳＣＬＣの計算と同様に注入電極面電界が零である条件を用いた。現実にはショットキー形やトンネル形のように電極面注入機構もあり，界面における電流制限が予想される。本節では，実験資料を基にこの問題を検討する。(43)

V (v)	Q_1 (C/cm^2)	Q_2 (C/cm^2)	$Q = Q_1 + Q_2$ (C/cm^2)	Vc (v)	$\bar{x}$ (μm)	Vcal (v)
4000	2.5×10^{-8}	1.5×10^{-8}	4.0×10^{-8}	400	15	370
5000	6.3×10^{-8}	3.3×10^{-8}	9.6×10^{-8}	638	14	930
6000	9.5×10^{-8}	4.2×10^{-8}	13.7×10^{-8}	850	12	1400

P.E. 試料　厚さ 40 μm

第6－1表　熱刺激電流によるトラップ電荷量測定と注入電極面電界が零の場合の印加電圧の計算

第6－1表は，ポリエチレンフィルムの熱刺激電流（ＴＳＣ）を測定して，トラップ電子について得られた結果を整理したものである。(43)すなわち，ポリエチレンのトラップは約１．１ｅＶの深さにあるほぼ単一なものである。(44)そして，ポリエチレンのバンドギャップが7ｅＶ程度であることを考えれば，かなり浅いトラップであり，電導状態では（6－16）式の関係式が成立していると考えられる。バイアス電圧Ｖを印加して電子をトラップさせ，次いで試料にＶに対して正負両極性で，Ｖよりかなり小さいコレクティング電圧V_cを印加したまま昇温してＴＳＣを測定した。V_cが表中に示された値より大きくなると，ＴＳＣの面積から計算される電荷（ＴＳＣ電荷）はほとんど一定となり，これをQ_1とQ_2で示してある。この電荷量は両電極を短絡したときにトラップ電荷によって両電極に誘起された電荷量を示しており，Q_1が注入電極に誘起されたもので，Q_2が他の電極に生じたものである。そして，$Q = Q_1 + Q_2$の

電荷量がトラップ電荷全量にあたる。また $\bar{x}$ は注入電極から測ったトラップの平均位置であって，

$$\bar{x} = \frac{Q_1}{Q_1 + Q_2} d \qquad \cdots\cdots (6-33)$$

で示されることになる。

さて，本数値計算法の諸式は試料の厚さや印加電圧によらず成立するものであることは既に説明したとおりである。従って，（6－20）式の印加電圧を示す式を用いて問題を検討するが，このVは第6－1表のバイアス電圧にあたる。ポリエチレンのトラップ電子によるTSCはその漏れ電流よりかなり大きい。このことは熱励起電子 N_0 がトラップ電子 N_{ti} に比べて十分小さいことを示しており，（6－20）式は次のように近似される。

$$V = \frac{e(p\ell)}{\varepsilon} \sum_{i=1}^{m} \left(m - i + \frac{1}{2}\right)(N_i + N_{ti})$$

$$= \left\{ \frac{ed(\theta+1)}{\varepsilon} \right\} \left\{ \sum_{i=1}^{m} N_{ti} - \sum_{i=1}^{m} \left(i - \frac{1}{2}\right) N_{ti} / m \right\}$$

$$\cdots\cdots (6-34)$$

上式で右辺第1項はトラップ全電荷Qを示し，第2項は平均位置 $\bar{x}$ によって次のように置き換えられる。

$$\bar{x} = \sum_{i=1}^{m} \left(i - \frac{1}{2}\right) p\ell\, N_{ti} \Big/ \sum_{i=1}^{m} N_{ti} \qquad \cdots\cdots (6-35)$$

従って

$$\sum_{i=1}^{m} \left(i - \frac{1}{2}\right) N_{ti} / m = \sum_{i=1}^{m} \left(i - \frac{1}{2}\right) p\ell\, N_{ti} / m(p\ell)$$

$$= \frac{\bar{x}}{d} \sum_{i=1}^{m} N_{ti} \qquad \cdots\cdots (6-36)$$

従って，（6－34）式は

$$V = \frac{d}{\varepsilon}(\theta+1)Q\,\frac{d-\bar{x}}{d} \qquad \cdots(6-37)$$

上式のQ，$\bar{x}$に第6－1表の測定値を入れてθ≪1として求めたVの値をV_{cal}として表中に示した。ただし，εを3.0とした。V_{cal}はVよりかなり小さいが，θ＝5～10として（6－37）式を計算すればV_{cal}とVとはほぼ等しくなる。しかし，前述のようにもれ電流がTSCより相当小さいことを考えると，通常この種の材料について考えられているように，トラップ電子の密度は自由電子の密度よりかなり大きく，このような大きなθを取上げることは無理であろう。そして，（6－37）式が注入電極面電界を零として導かれたものであることを考えると，むしろポリエチレンでは電界零の条件が成立していないとみるのが妥当と考えられる。

本論文の数値計算では，上記の電界零のときだけではなく，電界が知れれば容易に計算が行なえるものである。この問題に関するポリエチレンの実験資料に沿っての詳細な検討は次章にゆずる。

6－5　まとめ

本章ではイオンホッピングのモデルを拡張し，これより移動度，拡散定数並びに空間電荷電界を考慮した電子伝導の問題についての解析や数値計算のできることを示し，実例として空間電荷制限電流（SCLC）を取扱った。その結果SCLCの特徴ある電流－電圧特性が求められ，これは従来の拡散を無視した結果と大体同じであった。しかし本計算方法の特徴は試料内の空間電荷の分布を容易に明らかにできる点であり，拡散を無視することにより生じる注入電極面近傍の電荷密度が発散する不合理も生じない。従って，本計算方法はケーブルのような機器内の誘電体中の空間電荷やその電界を評価するのに役立つと考えられる。そして，前章と本章とを併せれば，ホッピング数値計算法はイオンホッピング伝導でもバンド伝導でも同様に取扱えることになり，誘電体電導現象に幅広く応用できることは明らかであろう。

第7章　拡散と電極界面電界を考慮した電子伝導現象の解析に関する研究

7-1　まえがき

前章では，ホッピング数値計算法が電子伝導現象の解析に適用できることを示し，従来より空間電荷制限電流（ＳＣＬＣ）の計算に用いられる注入電極界面電界零の条件で，拡散と空間電荷電界を考慮してＳＣＬＣの数値解析を示した。しかし，前章のポリエチレンフィルムについての測定結果からもわかるように，現実には電極界面で電流制限のある場合が多く，界面電界零の条件が成立しないのが一般的である。

このような上記の観点から本章の前半の部分では，一般的な電極面電界の問題をよく知られている吸収電流の測定値を用いて，これをホッピング数値計算法に取入れて解析する方法を示す。この零でない電極面電界を取入れることは，絶縁体の界面と内部の電流制限を同時に取扱うことになる。本章では実験と対比するためにポリエチレンフィルムについて解析を行なったが，フィルム内の電荷分布，電界分布が定められることは勿論のこと，電子の実効移動度の評価や界面における電荷注入機構の検討などもできることが示される。以上の数値解析を行なうにあたり新たに解決しなければならない問題は二件あり，一件は厚い試料で高電圧印加の場合にも計算できるようにすることである。他はすでに述べたが，吸収電流と電極面電界との関係を明らかにして，併せてこれをもとにした数値計算の方法を定めることである。

本章の後半の部分では，前半で得られた結果をもとにしたホッピング数値計算法の応用に関する事柄が扱かわれ，次の二項目が述べられている。

第一は以下のようである。前半の部分の解析から，ポリエチレンフィルム中の電子の実効移動度と電極面での注入電流と電界の関係が知られる。この特性は試料内の電導と電極からの電荷注入を支配するものであり，材質及び注入特性の同じ種々の形状の絶縁体の空間電荷分布や導電特性を求めうることを示し

ている。そこで，材質は同じであるが形状の異なる試料として最も簡単な厚さの違う同種のポリエチレンフィルムの特性を，上記特性より評価する方法を示す。そして，この方法と吸収電流測定を用いて前半部分の解析から得られる結果とを対比する。

第二は実用機器であるケーブルの問題を扱かう。すなわち，ケーブルには直流送電の実用化に向けて絶縁破壊との関係から空間電荷の問題がある。そこで，前半の部分の解析を用いて試料内の電荷分布などを評価する方法をケーブルに対して検討する。

7－2　高電圧印加に対するホッピング数値計算法の電流を表わす式

前章では，絶縁体試料の定常電子伝導をホッピング数値計算法で解析する方法を示した。すなわち，試料を電圧印加の厚さ方向にm等分したk（1，2，・・・，m）で示される位置に電荷N_kを置いて計算する方法である。そして，$P\ell$を計算に必要な試料を等分した間隔として，ポアソンの式を表わす（7－1）式，ドリフトと拡散からなる電流を表わす（7－2）の基本式，および境界条件を示す（7－3）式を以下のように導いて数値解析を行なった。

$$\Phi_k = -\frac{e(P\ell)^2}{d\varepsilon}\left\{\left(m-k+\frac{1}{2}\right)\sum_{i=1}^{k}\left(i-\frac{1}{2}\right)N_i + \left(k-\frac{1}{2}\right)\sum_{i=k+1}^{m}\left(m-i+\frac{1}{2}\right)N_i\right\} + \frac{k-\frac{1}{2}}{m}V \quad \cdots\cdots(7-1)$$

$$\frac{I}{D} = \left\{\frac{1-e(\Phi_{k+\frac{1}{2}}-\Phi_k)/kT}{P\ell}\right\}\cdot\frac{eN_k}{P\ell} - \left\{\frac{1-e(\Phi_{k+\frac{1}{2}}-\Phi_{k+1})/kT}{P\ell}\right\}\cdot\frac{eN_{k+1}}{P\ell} \quad \cdots\cdots(7-2)$$

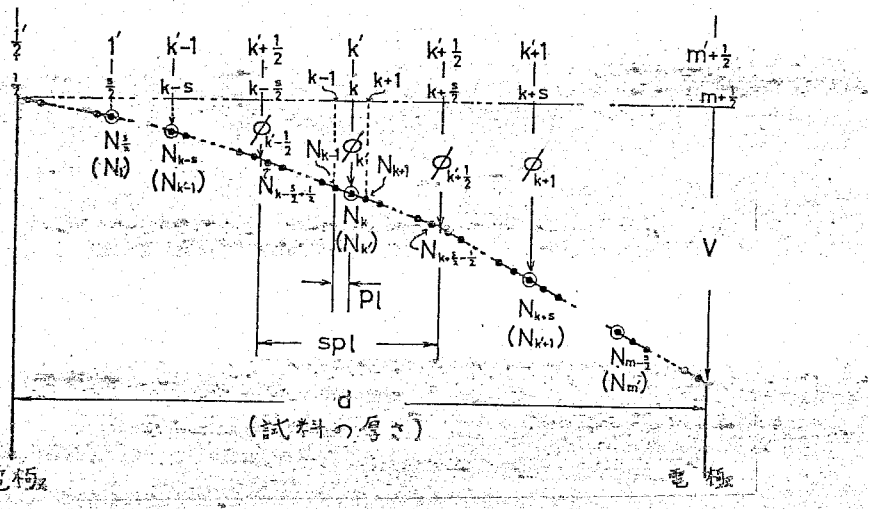
$$\frac{I}{D}=\left\{\frac{1-e(\phi_{m+\frac{1}{2}}-\phi_m)/kT}{p\ell}\right\}\cdot\frac{eN_m}{p\ell}$$
$$-\left\{\frac{1-e(\phi_{1-\frac{1}{2}}-\phi_1)/kT}{p\ell}\right\}\cdot\exp\left(-\frac{eV}{kT}\right)\cdot\frac{eN_1}{p\ell}$$
$$\cdots\cdots(7-3)$$

以上の式は試料の厚さや印加電圧Vには制限されないが，逐次計算法を用いているため計算途上で，

$$\left.\begin{aligned}1-e(\phi_{k+\frac{1}{2}}-\phi_k)/kT>0\\1-e(\phi_{k+\frac{1}{2}}-\phi_{k+1})/kT>0\end{aligned}\right\}$$
$$\cdots\cdots(7-4)$$

（7－4）式が満たされないと計算が実行できない。従って高電圧を印加するときの計算には，（7－2）式と（7－3）式に代わる式を導く必要がある。

いま第7－1図に示されるplが小さく，（7－4）式を満たすとする。そして新たに大きな間隔splを（sは整数）で試料をm′に等分し，分割点k′（＝1，2，・・・，m′）に$N_{k'}$なる数の電子があるとする。図にはN_k，$N_{k'}$をそれぞれ●と○で示すが，m′は（7－4）式を満たして数値計算できる程度の分割数である。ここで次のような近似の条件を置く。第7－1図を参照し，（i）$N_k/p\ell$と$N_{k'}/sp\ell$はともに電子濃度を示し，kとk′の位置が同じときは



第7－1図　数値解析に用いる試料内の荷電粒子の位置および電位

$$\frac{N_k}{P\ell} = \frac{N_{k'}}{sp\ell} \qquad \cdots\cdots(7-5)$$

(ii) k' をはさむ小区間 $k'-\frac{1}{2}\sim k'+\frac{1}{2}$ で N_k の和は $N_{k'}$ に等しく

$$\sum_{k=k-\frac{s}{2}+\frac{1}{2}}^{k+\frac{s}{2}-\frac{1}{2}} N_k = N_{k'} \qquad \cdots\cdots(7-6)$$

(iii) 上記の区間で電位は直線的に変化する。すなわち第7－1図に示す通りで，ϕ_k と $\phi_{k'}$ との間には次の関係がある。

$$\left.\begin{aligned}\phi_{k+\frac{1}{2}} - \phi_k &= (\phi_{k'+\frac{1}{2}} - \phi_{k'})/s\\ \phi_{k-\frac{1}{2}} - \phi_k &= (\phi_{k'-\frac{1}{2}} - \phi_{k'})/s\end{aligned}\right\}$$
$$(k = k-\tfrac{s}{2}+\tfrac{1}{2}, \cdots, k+\tfrac{s}{2}-\tfrac{1}{2}) \qquad \cdots\cdots(7-7)$$

定常状態を考えるので，(7－2)式の電流は外部回路の電流に等しく，

$$\frac{I}{D} = \frac{1}{d}\sum_{k=1}^{m}\left\{\frac{1-e(\phi_{k+\frac{1}{2}}-\phi_k)/kT}{P\ell}\cdot\frac{eN_k}{P\ell} - \frac{1-e(\phi_{k+\frac{1}{2}}-\phi_{k+1})/kT}{P\ell}\cdot\frac{eN_{k+1}}{P\ell}\right\}P\ell$$
$$= \frac{1}{m}\sum_{k=1}^{m}\left\{\frac{1-e(\phi_{k+\frac{1}{2}}-\phi_k)/kT}{P\ell} - \frac{1-e(\phi_{k-\frac{1}{2}}-\phi_k)/kT}{P\ell}\right\}\frac{eN_k}{P\ell}$$
$$\cdots\cdots(7-8)$$

ここで条件(ii)を用い，$d = mp\ell$ を使用した。(7－5)式の右辺のうち，第7－1図に示す $k'-\frac{1}{2}\sim k'+\frac{1}{2}$ の区間の和を $\Delta(I/D)_k$ で示し，(7－5)，(7－7)式の条件を用いると，

$$\Delta\left(\frac{I}{D}\right)_k = \frac{1}{m}\sum_{k=k-\frac{s}{2}+\frac{1}{2}}^{k+\frac{s}{2}-\frac{1}{2}}\left\{\frac{1-e(\phi_{k+1}-\phi_k)/kT}{P\ell}\right.$$

$$- \frac{1-e(\Phi_{k-\frac{1}{2}}-\Phi_k)/kT}{P\ell} \Bigg\} \frac{eN_k}{P\ell}$$

$$= \frac{1}{m} \left\{ \frac{1-e(\Phi_{k'+\frac{1}{2}}-\Phi_{k'})/skT}{P\ell} - \frac{1-e(\Phi_{k'-\frac{1}{2}}-\Phi_{k'})/skT}{P\ell} \right\} \sum_{k=k-\frac{s}{2}+\frac{1}{2}}^{k+\frac{s}{2}-\frac{1}{2}} \frac{eN_k}{P\ell}$$

$$= \frac{s}{m} \left\{ \frac{1-e(\Phi_{k'+\frac{1}{2}}-\Phi_{k'})/skT}{P\ell} - \frac{1-e(\Phi_{k'-\frac{1}{2}}-\Phi_{k'})/skT}{P\ell} \right\} \frac{eN_{k'}}{sP\ell}$$

・・・・・(7-9)

ただし，最後の式変形には条件（ii）の（7-6）式き用いた。上式は$N_{k'}$による電流への寄与分を示すので，試料全体にわたって（7-9）式き集めれば（7-8）式となり，$m=m's$として

$$\frac{I}{D} = \frac{1}{m'} \sum_{k'=1}^{m'} \left\{ \frac{1-e(\Phi_{k'+\frac{1}{2}}-\Phi_{k'})/skT}{P\ell} - \frac{1-e(\Phi_{k'-\frac{1}{2}}-\Phi_{k'})/skT}{P\ell} \right\}$$

$$\times \frac{eN_{k'}}{sP\ell} \qquad \cdots\cdots(7-10)$$

（7-10）式は（7-8）式と全く同じ電流の表示式であるので，第1項と第2項はそれぞれ逆方向に移動する電子$N_{k'}$による電流を示す。よって（7-2）式のようにk'とk'+1間の電流に分割して示せば，

$$\frac{I}{s^2D} = \left\{ \frac{1-e(\Phi_{k'+\frac{1}{2}}-\Phi_{k'})/skT}{sP\ell} \right\} \cdot \frac{eN_{k'}}{s(sP\ell)}$$

$$- \left\{ \frac{1-e(\Phi_{k'+\frac{1}{2}}-\Phi_{k'+1})/skT}{sP\ell} \right\} \cdot \frac{eN_{k'+1}}{s(sP\ell)}$$

・・・・・(7-11)

以上の解析からもわかるように（i）～（iii）の近似の条件を許す限り，sをどのように大きくしてもよいので，（7-11）式の右辺の両項を常に正に保つことができ，（7-4）式の条件が成立する。従って，（7-11）式を高電圧印加の場合のホッピング数値計算に用いることができる。上式では，$N_{k'}$と印加電圧Vを一次に含む$\Phi_{k'}$の項がsで割られていることに対応し，電子濃

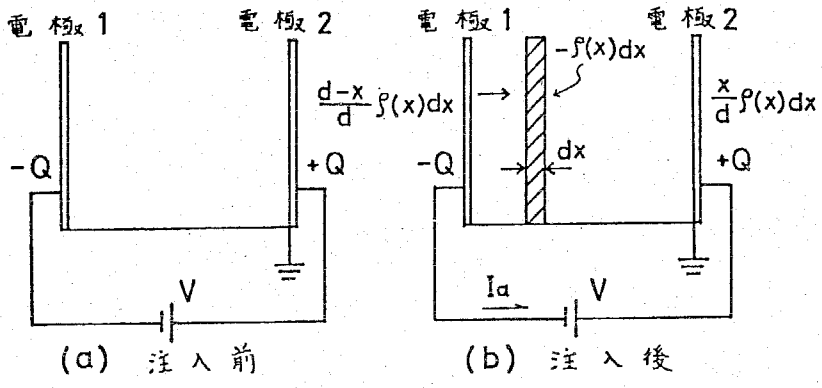
度N_k/splもSで割られて示されている。(7-3)式に代わる境界条件も(7-11)式と同様に次のようになる。

$$\frac{I}{S^2D}=\left\{\frac{1-e(\Phi_{m'+\frac{1}{2}}-\Phi_{m'})/skT}{spl}\right\}\cdot\frac{eN_{k'}}{s(spl)}$$
$$-\left\{\frac{1-e(\Phi_{1'-\frac{1}{2}}-\Phi_{1'})/skT}{spl}\right\}\cdot\exp\left(-\frac{eV}{kT}\right)\cdot\frac{eN_{1'}}{s(spl)}$$
$$\cdots\cdots(7-12)$$

7-3 吸収電荷と電極面電界[45),(46)]

空間電荷制限電流(SCLC)の計算にもみられるように，試料内の一点の電界を与えなければ空間電荷や導電特性を決定できない。このことは試料と電極との界面における電流制限を決めなければ解析できないことを示している。従来のSCLCの計算では，注入電極面で界面電界が零であるとして解析されている。ここではこれを零とせず，吸収電流の測定値を用いて，注入電極面とは逆の対向電極面の電界を決定して数値解析を行なう。以下，吸収電流I_aの時間積分値として得られる吸収電荷Q_a($=\int_0^\infty I_a\,dt$)と電極面電界との関係を示す。ただし，Q_aは試料内に電子が注入されたことによる電荷とする。

いま第7-2図に示すように，注入前に印加電圧Vによって電極に$\pm Q$の電荷が生じているとし，その後電極1よりxの位置に$-\rho(x)dx$の電荷が注入されたとする。このとき電圧Vは維持されているので，両電極には図示するように，$\{(d-x)/d\}\cdot\rho(x)dx$，$(x/d)\rho(x)dx$



第7-2図 注入電荷と吸収電荷の関係

の電荷が誘起されることになる。このとき電圧が一定であるから電界の変化による双極子分極の効果は考える必要はない。このような電荷の誘起は，外部回路を通して $(x/d)\rho(x)dx$ なる電荷が電極1から電極2へ移動したこと示しており，これが吸収電荷として測定される。よって Q_a は次式の積分で表わされる。

$$Q_a = \int_0^d \frac{x}{d}\rho(x)dx \qquad \cdots\cdots (7-13)$$

そして Q_a は電極2に蓄積された電荷量であるので，これによって発生する電極面電界 $E_d(ind)$ は，

$$Q_a = \varepsilon_0 \varepsilon_s E_{d(ind)} \qquad \cdots\cdots (7-14)$$

電圧Vが印加され，吸収電荷 Q_a が測定されたときは，注入電極と反対の対向電極2の面の電界 E_d は，

$$E_d = \frac{V}{d} + \frac{Q_a}{\varepsilon_0 \varepsilon_s} \qquad \cdots\cdots (7-15)$$

従って吸収電流を測定して電極面電界 E_d を定め，これを用いて数値計算することができる。

7-4 SCLCの数値解析のための関係式

この節では，第7-2節で導いた一般関係式及び第7-3節に示した対向電極面の電界を用いてSCLCを解析する具体的な諸式を示す。注入がかなり多く熱励起電子が無視され，しかもまだ十分トラップの空いているいわゆる電流-電圧の二乗特性に限って記述するが，これは実験試料の吸収電流測定がこの範囲で求められているためである。

試料内の x' の位置にある自由電子とトラップ電子の数を $N_{x'}$，$N_{tx'}$ とし，第6章で扱ったように浅いトラップであるとして，$N_{x'}/N_{tx'} = \theta$（一定）$\ll 1$ とする。数値解析のための諸式はほとんど前章と同様であるので，計算に

用いられる諸量の換算式および換算式を用いて示される基本関係式を，それぞれ第7－1，2表に示す。

	表　示	換　算　式
電子数	$N_{k'}$	$\tilde{N}_{k'}=\frac{N_{k'}(s\,p\,l)}{\varepsilon_s\theta}$
電　界	$E_{k'}$	$\tilde{E}_{k'}=\frac{E_{k'}(s\,p\,l)}{s}$
電　流	I	$\tilde{I}=\frac{s\,I}{e\,s^2\,D\theta}(s\,p\,l)^3$

第7－1表　　計算に用いられる諸量の換算式

電界の式	$\tilde{E}_{k'}=-\frac{2}{s}(\phi_{k'+1/2}-\phi_{k'})=\frac{2}{s}(\phi_{k'+1/2}-\phi_{k'+1})$	(7－16)
ポアソンの式	$\tilde{E}_{k'}-\tilde{E}_{k'-1}=-\frac{e}{\varepsilon_0\varepsilon_s}\tilde{N}_{k'}$	(7－17)
電流の基本式	$\tilde{I}=\{1-e(\phi_{k'+1/2}-\phi_{k'})/skT\}\tilde{N}_{k'}$ $-\{1-e(\phi_{k'+1/2}-\phi_{k'+1})/skT\}\tilde{N}_{k'+1}$	(7－18)
境界条件	$\tilde{I}=\{1-e(\phi_{m'+1/2}-\phi_{m'})/skT\}\tilde{N}_{m'}$ $-\{1-e(\phi_{1'-1/2}-\phi_{1'})/skT\}\exp(-eV/kT)\tilde{N}_{1'}$	(7－19)
印加電圧	$\frac{V}{s}=-\sum_{k'=1}^{m'}\tilde{E}_{k'}$	(7－20)

注) s＝1 の場合は第6章の結果と同様

第7－2表　　計算に用いられる基本関係式

7－2表の基本関係式を用いれば前章と同様にして数値解析できる。さらに注入電荷量Q_{inj}は下式より求められる。

$$Q_{inj}=\sum_{k'=1}^{m'}e\frac{N_{k'}}{\theta}=\frac{e\varepsilon_s}{(s\,p\,l)}\sum_{k'=1}^{m'}\tilde{N}_{k'}\quad\cdots\cdots(7-21)$$

7－5　ポリエチレンフィルムについての解析結果

ここでは，厚さ40μm，電極面積8cm^{2}のポリエチレンフィルムの両面

にAlの蒸着電極を付けた試料について吸収電流を測定し，この結果を用いて行なった数値計算の結果を示す。ポリエチレンについてはTSCやTSCとTL（熱刺激発光）の同時測定などによって調べられ，かなりの注入トラップ電子があり，また本試料ではトラップの深さが1.1eV程度で浅いトラップと考えられる。(44)

<7-5-1> 数値計算の手順

数値計算のための試料の分割数m'を50としたので，ホッピング距離spl=0.8μmである。測定電圧は2000～5000Vで，測定温度はT=298Kであるから（7-4）式と同様な条件

$$\left.\begin{aligned} 1 - e(\phi_{k'+\frac{1}{2}} - \phi_{k'})/skT > 0 \\ 1 - e(\phi_{k'+\frac{1}{2}} - \phi_{k'+1})/skT > 0 \end{aligned}\right\} \quad \cdots\cdots (7-22)$$

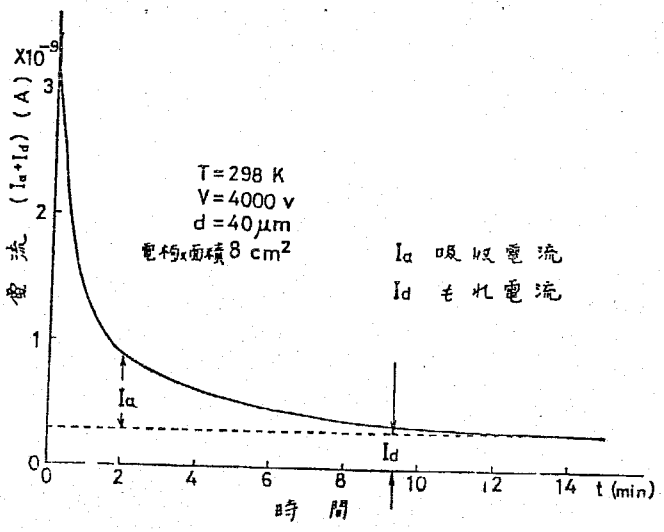
を満足するようにs=10^4としたが，計算には支障がなかった。

吸収電荷の測定によって電極面電界E_dが決められるが，第7-1図を参照してこれは$E_{m'}$であり，したがって$\tilde{E}_{m'}$が与えられる。そして，この場合の印加電圧Vも与えられている。電流（もれ電流）Iも決っているが，Dθが不明なために$\tilde{\Sigma}$は定まらない。そこで数値計算では，まず$\tilde{\Sigma}$を設定し，任意の$\tilde{N}_{m'}$を与えれば$\tilde{E}_{m'}$が決っているので（7-17）式より$\tilde{E}_{m'-1}$が決まる。$\tilde{E}_{m'-1}$が決まれば（7-16）式より$(\phi_{m'-\frac{1}{2}} - \phi_{m'-1})$と$(\phi_{m'-\frac{1}{2}} - \phi_{m'})$が決まり，（7-18）式を用いて$\tilde{N}_{m'-1}$が決定される。このように（7-16）～（7-18）式を順次使用して，一連の$\tilde{N}_{k'}$，$\tilde{E}_{k'}$及び$(\phi_{k'+\frac{1}{2}} - \phi_{k'})$，$(\phi_{k'+\frac{1}{2}} - \phi_{k'+1})$が定められる。これらの値が境界条件（7-19）式を満足するように$\tilde{N}_{m'}$と$\tilde{\Sigma}$を変えて計算すればよいが，その際印加電圧Vを示す（7-20）式が満足されるように$\tilde{N}_{m'}$と$\tilde{\Sigma}$を定める。そして，これらが求める解となる。

<7-5-2> 解析結果

まず，第7-3図にはポリエチレン試料の吸収電流測定結果の一例を示した。(45)

14分程度経過した時点で吸収電流I_aが消滅したとして図のようにもれ電流I_dとI_aを分離したが，時間零の付近では試料の容量による急激に減少する電流は除かれている。第7－3表には，吸収電流測定から得られる諸量を示した。この中でQ_sは1kHzで測定された試料の比誘電率$\varepsilon_s = 2.3$から，$Q_s = \varepsilon_0 \varepsilon_s V/d$として計算された分極電荷量である。また，以後に示すホッピング数値計算法による解析の結果得られた注入電極面電界E_0および空間電荷によって発生している注入電極面電界$E_{0(ind)}$も併せて示した。



第7－3図　吸収電流の測定例

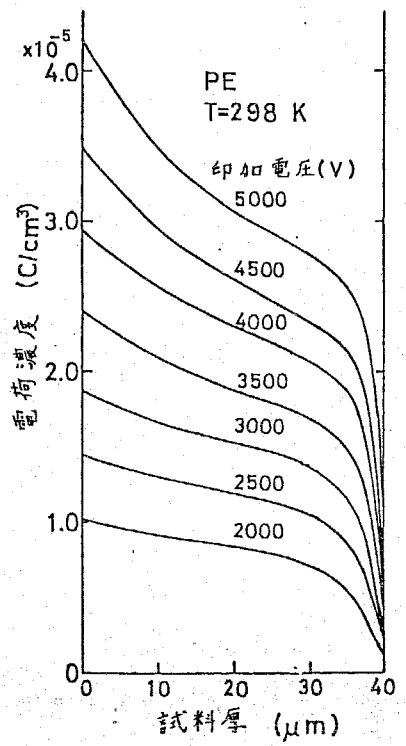
(V)	Q_a (C/cm^3)	$E_{d(ind)}$(v/cm)	E_d (v/cm)	Q_a/Q_sx100	$\bar{E}$ (v/cm)	$E_{0(ind)}$(v/cm)	E_0 (v/cm)
2000	1.30 x10^{-8}	6.38 x10^4	5.64 x10^5	12.77	5.00 x10^5	- 8.84 x10^4	4.12 x10^5
2500	1.90 x10^{-8}	9.33 x10^4	7.18 x10^5	14.93	6.25 x10^5	-13.26 x10^4	4.92 x10^5
3000	2.50 x10^{-8}	12.28 x10^4	8.73 x10^5	16.37	7.50 x10^5	-17.09 x10^4	5.79 x10^5
3500	3.00 x10^{-8}	14.73 x10^4	10.22 x10^5	16.84	8.75 x10^5	-22.00 x10^4	6.55 x10^5
4000	3.70 x10^{-8}	18.17 x10^4	11.82 x10^5	18.17	10.00 x10^5	-27.00 x10^4	7.30 x10^5
4500	4.70 x10^{-8}	23.08 x10^4	13.56 x10^5	20.51	11.25 x10^5	-28.80 x10^4	8.37 x10^5
5000	5.30 x10^{-8}	26.03 x10^4	15.10 x10^5	20.82	12.50 x10^5	-36.10 x10^4	8.89 x10^5
備考	吸収電流測定の結果					ホッピングモデルによる計算値	

第7－3表　吸収電流測定の結果およびホッピング数値計算法による解析結果[45]

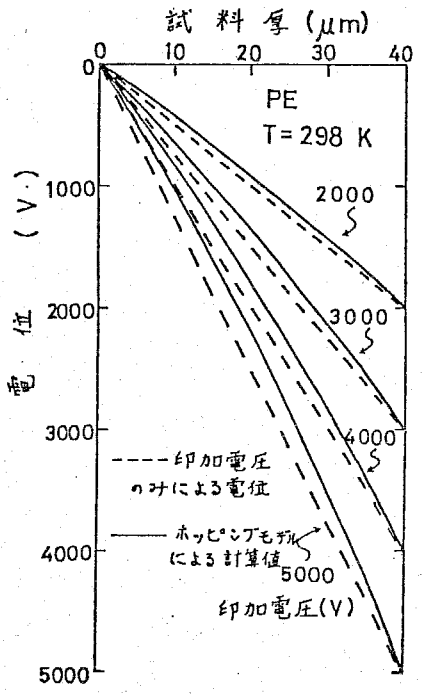
Q_a：吸収電荷，$E_{d(ind)}$：注入電荷による対向電極面電界，E_d：対向電極面電界，$Q_a/Q_s \times 100$；吸収電荷Q_aとその他の分極電荷量Q_sの割合，$\bar{E}$；平均電界，$E_{0(ind)}$：注入電荷による注入電極面電界，E_0：注入電極面電界

第7－4図は試料中の$(\ell' - \frac{1}{2})s\rho\ell$の位置の電荷密度を$N\ell'/s\rho\ell$で示したものである。電荷はかなり中まで注入されているが，TSCで測定した結果においても平均注入距離は注入電極から測って十数μmであると考えられた。第7－5図はフィルム内部の電位分布で，やはり上記の位置の電位を$\phi_{\ell'}$で示してある。ただし，注入電極面の電位$\phi_{\frac{1}{2}}$を零としてある。図に示されるように，この電位は印加電圧のみによる電位とそれ程変化していない。これは電極面でのかなりの電流注入制限があるものと考えられる。第7－6図は電界分布で，図からもわかるように注入電極面電界は零となっていない。また，平均電界と注入電極面電界との違いは第7－3表において，$\bar{E}$とE_0で示されている。

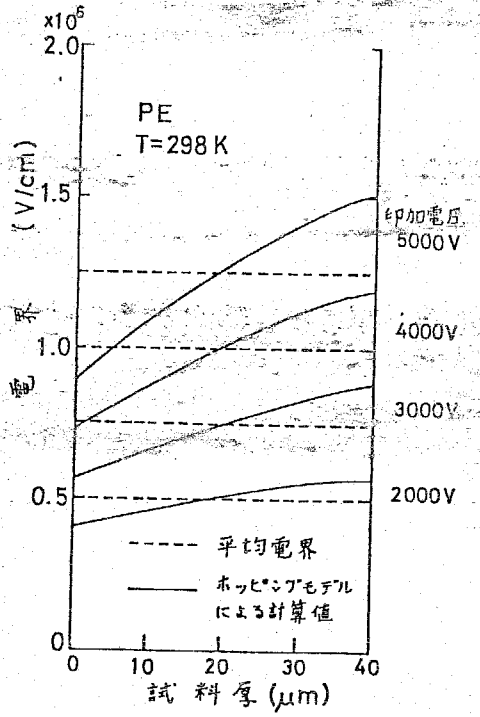
電流－電圧特性の実測値との比較を第



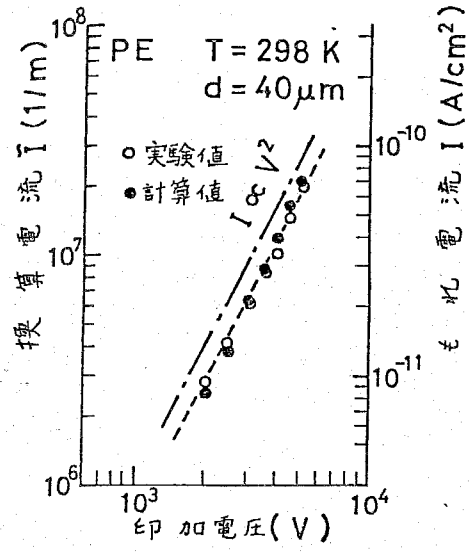
第7－4図　絶縁体中の電荷分布の計算例



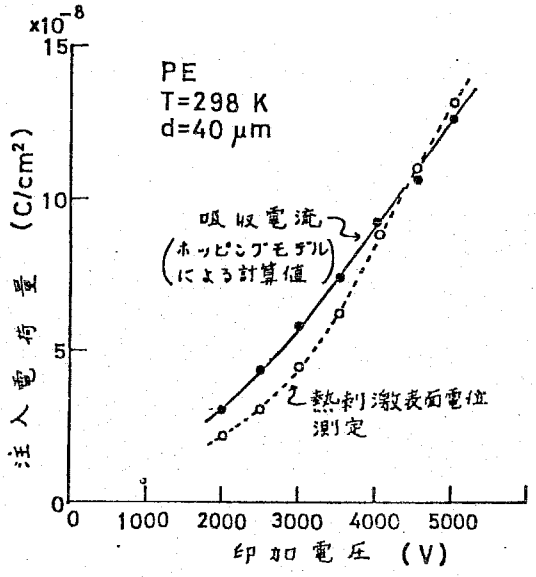
第7－5図　絶縁体中の電位分布の計算例



第7－6図　絶縁体中の電界の計算例



第7－7図　もれ電流と印加電圧の関係



第7－8図　計算による注入電荷量と熱刺激表面電位測定による注入電荷量の比較

7－7図に示す。実測値はもれ電流Iを●で示し，換算電流Jの値を示す縦軸はIとJが重なるようにずらしてある。しかし，電流電圧特性がほぼ二乗に近いことは両者一致している。また注入電荷量に対する照合を第7－8図に示す。同種のポリエチレンについて熱刺激表面電位から測定した値が図示されているが，吸収電流測定値からホッピング数値計算法で得られた値とほぼ同程度であった。

7－6　実効移動度と注入電極界面電界の評価

前節では，ポリエチレンに関する数値解析と実測結果とを比較して示した。電流－電圧特性の二乗特性の一致や注入電荷量がほぼ対向していることから，本数値計算の結果が実際の空間電荷特性や導電特性を求めえたものと考えられる。このように数値計算の結果が試料の特性を示しているとみると，以下のようにポリエチレン中の電子の実効移動度と電極からの電流注入特性を評価する

ことができる。

<7-6-1> 実効移動度について[47),(48)]

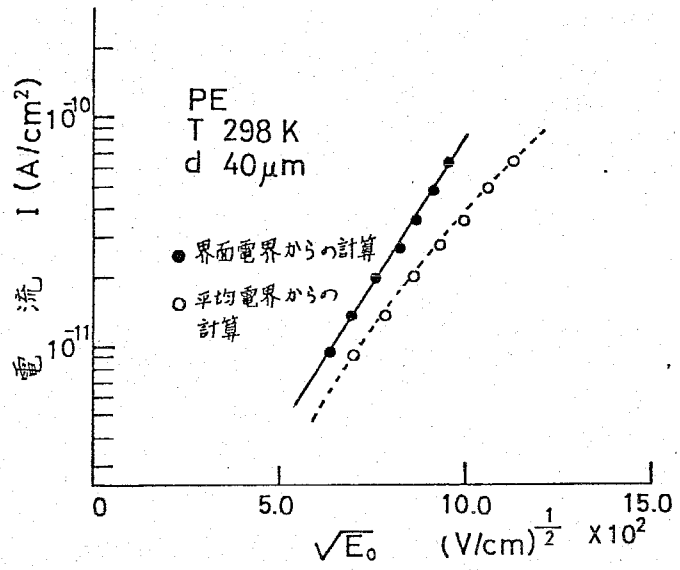
移動度μと拡散定数Dとの間のアインシュタインの関係を用い，第7-1表の電流の換算式を使用すると実効移動度μθは次のように表わされる。

$$\mu_{eff} = \mu\theta = \frac{e\theta D}{kT} = \frac{(spl)^3}{S\varepsilon_s kT}\frac{I}{\bar{I}} \quad \cdots (7-23)$$

数値計算で得られた電流-電圧特性が実測値と等価であるとすると(7-23)式のIと第7-7図に示した実測値を用い，$\bar{I}$としてやはり同図にあげた値を使用すれば，$spl = 0.8\,\mu m$，$S = 10^4$，$T = 298\,K$，$\varepsilon_s = 2.3$などを用いてμ_{eff}を求めうる。第7-7図よりI/$\bar{I}$はほぼ一定で，$\mu_{eff} = 1.8 \times 10^{-12}\,cm^2/V\cdot sec$が得られた。この値は，ほぼ妥当な値と考えられて他の研究者の報告にもみられる。[47)~(48)]

<7-6-2> 電流注入特性及び電極面電界

ショットキー形注入にしてもトンネル形注入にしても，電極からの電流注入特性は注入電流と電極面電界によって与えられている。本数値計算では電極面電界E_0が求められるので，上記の電流注入特性$I \sim E_0$はただちに知られる。第7-9図にはポリエチレンについて得られた特性を示した。これによると$\ln I \sim \sqrt{E_0}$のほぼ直線に近い関係となり，ショットキー形の注入機構を思わせる。この直線の傾斜は$5.90 \times 10^{-3}\,A/(V/cm)^{\frac{1}{2}}(cm^2)$で，ショットキー形として$\sqrt{e/4\pi\varepsilon_0\varepsilon_s}/kT$から得られる$9.66 \times 10^{-3}$のほぼ半分であった。この理由などは不明であるが，このようにI~



第7-9図 電界と電流の関係

E_0の特性を評価しうることは電流注入機構を検討する手掛りとなるであろう。さらに同図には従来から行なわれているように$E=V/d$なる平均電界をE_0とみなしたときの特性も示したが，直線関係とはなっていない。

さらに，零でない注入電極面電界は界面における電流注入制限が存在することを示している。もしもこれがなければ，従来のSCLCで取扱われているように電界が零であると考えられるからである。そして，注入機構が何であっても注入の程度は電極面電界に現われ，本数値計算法は適用できると考えられる。このことは他方の電極界面についても同様であろう。

また，従来より電流制限についてはバルクと界面が別々に検討されているが本数値計算ではこれらを同時に取扱えることを示している。

7－7　膜厚の異なるポリエチレンフィルムの評価

「まえがき」でも述べたように，試料の電導が電子による場合，電子の実効移動度と電極からの注入特性が知れると，これをもとにして材質の同じ形状の異なる試料の特性をホッピング数値計算法を用いて評価できる。以下にその解析と，異なる試料として厚さの違うものを用いた場合の結果を示す。

<7－7－1>　実効移動度と電流注入特性を与えた場合の数値解析法

第7－1表の電流換算式を用いれば，実効移動度$\mu\theta$が与えられているので$D\theta$の値はアインシュタインの関係式より知られ，さらに$\tilde{I}$が求められれば実際の電流Iが知られる。電流注入特性はIつまり$\tilde{I}$と電極面電界との関係である。電極面電界E_0は，注入電極面の電界であって第7－2表の（7－16）式より$\phi_{\frac{1}{2}'}=0$として次のようである。

$$\tilde{E}_0=E_0'(Sp\ell)/S=\frac{2}{S}\phi_{1'} \quad \cdots\cdots(7-24)$$

このように電流注入特性$\tilde{I}\sim\tilde{E}_0$が与えられれば，ある電流$\tilde{I}$に対して$\tilde{E}_0$が決まり，（7－24）式から$\phi_{1'}$が定まる。したがって$\tilde{N}_{1'}$を設定すれば（7－17）式より$\tilde{E}_{1'}$が設定される。これによって（7－16）式から（$\phi_{1+\frac{1}{2}}$

$-\phi_{1'}$)と($\phi_{1'+\frac{1}{2}}-\phi_{2'}$)が定まり，(7-18)式によって$\tilde{N}_2$が決定される。このようにして(7-16)～(7-18)式から一連の$\tilde{N}_{k'}$および($\phi_{k'+\frac{1}{2}}-\phi_{k'}$)，($\phi_{k'+\frac{1}{2}}-\phi_{k'+1}$)が求められる。そして，これらの一連の値が(7-19)式の境界条件を満足するように最初の$\tilde{N}_{1'}$の設定値を変えて計算し，電荷分布$\tilde{N}_k$を決定する。その結果，試料内の電界，電位の分布や電流-電圧特性などすべて求まる。ただし，(7-19)式には(7-20)式によって得られるVを代入する。また，全注入電荷量Q_{inj}は(7-21)式より求められる。

<7-7-27> ポリエチレンフィルム試料についての数値計算と実験結果

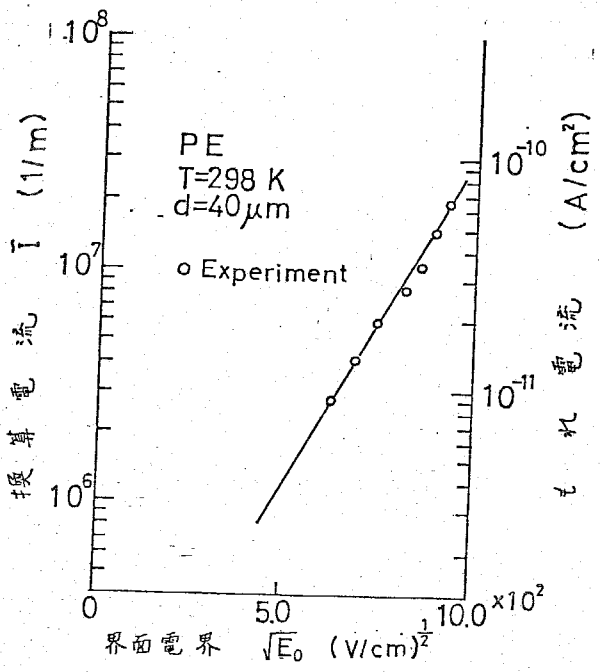
実験では，厚さ40μmと25μmの同種の低密度ポリエチレンフィルムの両面にいずれも8cm^{2}のAl蒸着電極を付けた試料を用いた。数値計算では試料の分割数，つまりmの値を50とした。従って40μmの試料では$spl=0.8\mu m$であり，25μmのものでは$spl=0.5\mu m$である。また，Sの値はいずれも$S=10^4$，温度は$T=298K$で印加電圧は$V=500\sim3000V$の場合の計算を行なったが，この条件では(7-22)式が満足されていて，数値計算が支障なく実行された。

(a) 実効移動度と電流注入特性

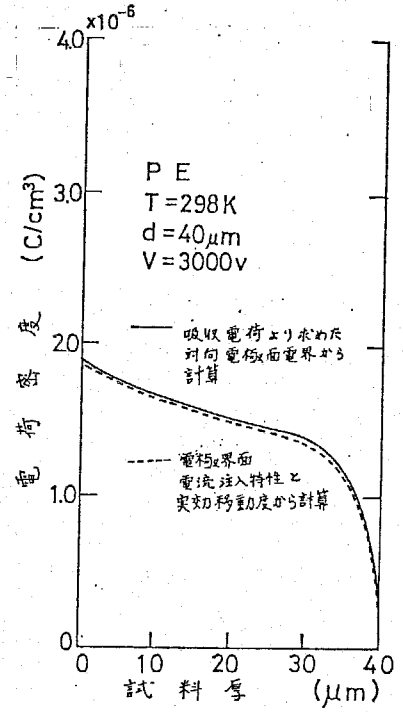
数値計算に用いる実効移動度と電流注入特性は前節で示したものを用いるが，実効移動度は$1.8\times10^{-12}cm^2/V\cdot sec$であり，電流注入特性は第7-10図のようである。第7-10図では，わかりやすくするために電極面電界を換算値$\bar{E}_0$でなく実際の値E_0で示してあるが，$\ln J$と$\sqrt{E_0}$は直線関係にあることがわかる。以後の計算では，第7-10図中の実線で示される特性を用いる。

(b) 数値計算の確認

第7-5節では，吸収電流測定結果を用いて空間電荷や電流-電圧特性を求め，これを実測結果と比較して実効移動度と電流注入特性を得た。<7-7-1>項では，これらの特性をもとにして吸収電流測定を行なわずに空間電荷



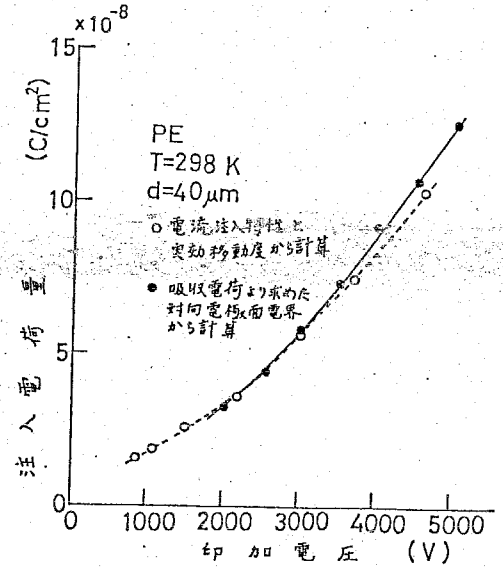
第7－10図　電極界面電界と電流の関係



第7－11図　ホッピング数値計算法の確認（試料内電荷分布）

や電流－電圧特性を定めうることを述べた。そこで，ホッピング数値計算法を確認する意味で同じ試料について上記の二種の計算を行ない比較したのが第7－11図と第7－12図である。第7－11図は試料内電荷密度の厚さ方向についての計算結果で，吸収電流の時間積分つまり吸収電荷より第7－6節と同様に求めた電荷密度が，その計算で得られた電流注入特性と実効移動度から逆に計算したものとほぼ一致している。図は40μmの試料に3，000Vを印加した場合の一例であるが，若干の差は注入特性の読みとり誤差などによると考えられる。

第7－12図は，注入電荷量の印加電

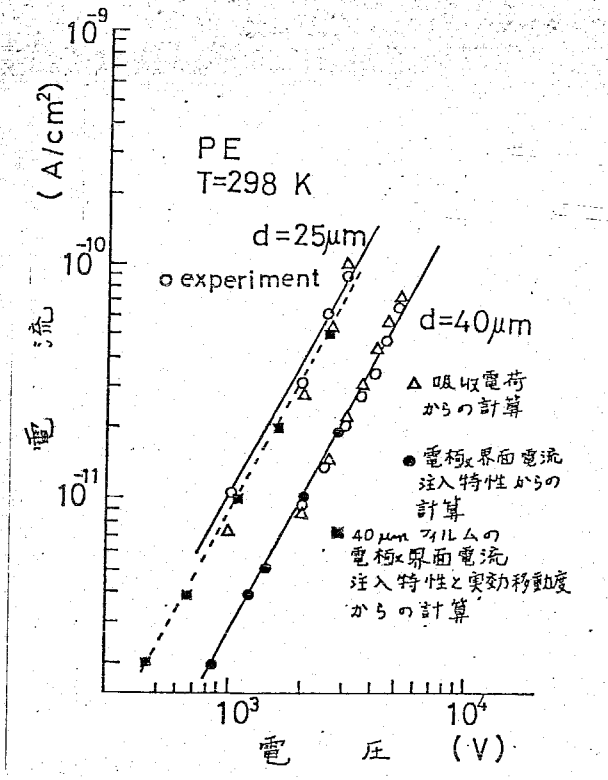


第7－12図　ホッピング数値計算法の確認（試料内全注入電荷量）

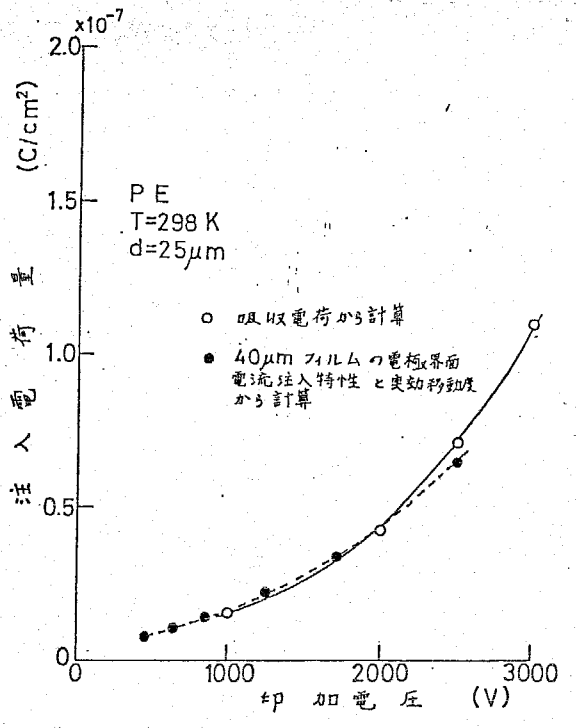
圧に対する関係を求めたもので，やはり両計算ともほぼ一致している。このような結果から，ホッピング数値計算法による解析が妥当な値を示していることが確認される。

(c) 厚さの異なる試料の計算結果

厚さの異なる試料についての電流-電圧特性を前記の二通りの方法で計算したもの及び実験値などを併せて第7-13図に示した。計算値，実験値とも両試料でほぼ一致しているが，ここで特に注目すべきところは40μmの試料から得られた電流注入特性と実効移動度を用いて25μmの特性を計算したものが，その試料の吸収電荷から得られたもの及び実測値とほぼ一致することである。25μm試料の実線は，従来の空間電荷制限電流理論(拡散を無視してかつ注入電極面電界を零とする。)によって40μmの実線の特性から求められたものであり，図にみられるように数値計算の結果はいくらか小さな値が得られている。



第7-13図 電極界面での電流注入特性と実効移動度より求められた電流-電圧特性と他の方法で求められた特性との比較文

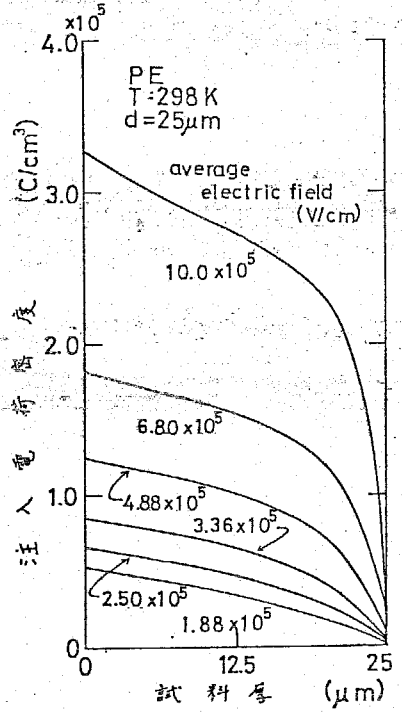


第7-14図 電極界面での電流注入特性と実効移動度から求められた空間電荷量と吸収電荷から求められた空間電荷量との比較

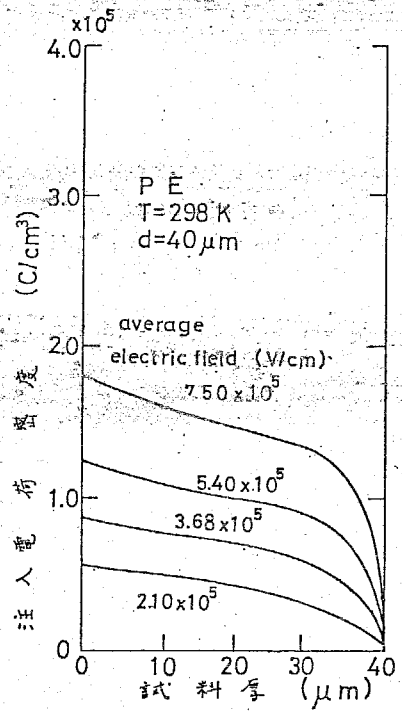
第7－14図は第7－13図と同じ意味を持つ結果で，40μmの試料から得られた電流注入特性と実効移動度から25μmの試料の注入電荷量と印加電圧との関係を求めたもので，25μmの吸収電荷から得た特性とほぼ一致している。

第7－13図，第7－14図の結果をみるとき，ある厚さの試料について吸収電流を測定してホッピング数値計算法によって実効移動度と電流注入特性を求めておけば，同種の絶縁材料で同種の電極を持つような厚さの異なる試料の空間電荷特性，電流電圧特性などき数値計算することができると考えられ，惹いては形状の異なる試料についての上記特性の評価も可能になると思われる。

第7－15図（a），（b）は両試料の注入電荷密度の分布を示したもので，図の（a）は電流注入特性と実効移動度から求めた25μmの試料のもとで，（b）は吸収電流の測定を用いて計算された40μmの試料結果である。両図を比較すると同じ大きさの平均電界でほぼ同じ程度の電荷分布となっているが，



（a）電流注入特性と実効移動度より求めたPEの電荷分布



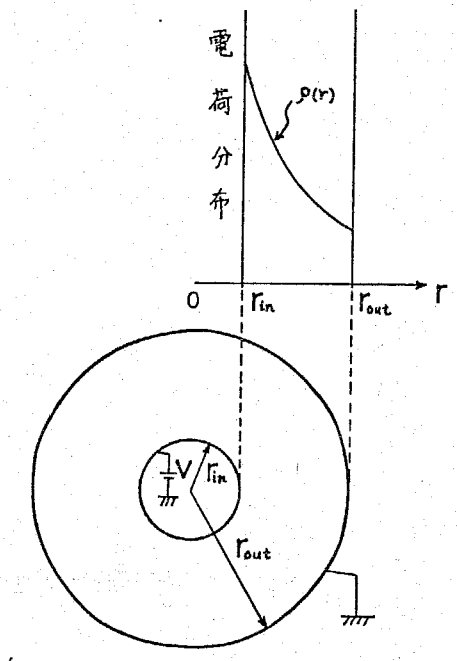
（b）吸収電流測定より求めたPEの電荷分布

第7－15図

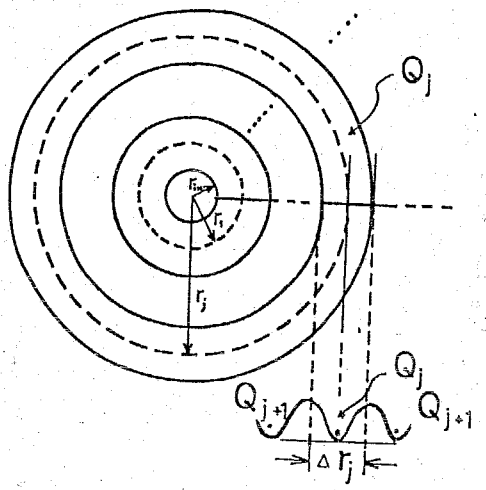
電極付近で若干の差が生じている。例えば，25μmの試料の平均電界6.8×10^{5}V/cmにおける電極面での電荷密度と，40μmの試料の平均電界7.5×10^{5}V/cmにおける電荷密度はともに約1.8×10^{5}C/cm^{3}と同じである。恐らく厚さがもっと大きくなれば，空間電荷電界と拡散による効果が同時に入るために非線形性も強くなり，電荷分布にかなり大きな差異が生ずるものと考えられる。

7-8 ケーブルの絶縁設計への応用[49)~51)]

直流送電の実用化に伴ない，ケーブル絶縁体中に形成される空間電荷電界が絶縁破壊と関連して注目されている。ケーブル絶縁体中に形成される空間電荷分布を決定し，内部空間電荷電界を求めることは耐電圧を評価して絶縁設計における仕様を定める上で役立つ。本節ではこのような立場から，前節までに得られた結果を総合し，工学的応用を目的として実際にケーブル絶縁体中に形成される空間電荷分布を決定する問題を扱かう。使用するものはホッピング数値計算法と吸収電流測定であり，前節までと変わりないが形状が同筒形である点が異なっている。そのために最初この形状におけるホッピング数値計算法の基本式などを求める。



第7-16図 ケーブル絶縁体の断面構造



第7-17図 ホッピング数値計算法におけるケーブル絶縁体の扱い

<7-8-1>ケーブル絶縁体に対するホッピング数値計算法の基本式*

ケーブル絶縁体の断面構造は，

* 付録6参照

第7－16図に示されたように円筒形状である。ホッピング数値計算法でこの形状の試料を扱かうためには，第2章で述べたように中心より同心円の領域で第7－17図のように分割して考える。その場合，各領域内の電荷 Q_j は図に示すように，各領域内の中心部ポテンシャル井戸にそれらの電荷がすべてあるとする一次元モデルで記述される。そして，電荷の挙動を示す基本方程式はこのモデルより導くことができる。第7－17図を参照して，内径よりj番目の領域における電荷の挙動を示す運動方程式を表わせば，その領域より隣接するj－1とj＋1番目の領域への電荷の遷移で示され次のようである。

$$\frac{dQ_j}{dt} = \omega_{j-1,j} Q_{j-1} - (\omega_{j,j-1} + \omega_{j,j+1}) Q_j + \omega_{j+1,j} Q_{j+1}$$

$$(j = 1, 2, \cdots, n) \quad \cdots\cdots (7-25)$$

ただし，$\omega_{j,j+1}$，$\omega_{j,j-1}$ は遷移確率を表わし，

$$\left.\begin{aligned} \omega_{j,j+1} &= \nu \exp\left(-\frac{W}{kT}\right) \exp\left(-\frac{q}{kT}(\phi_{j+\frac{1}{2}} - \phi_j)\right) \\ \omega_{j,j-1} &= \nu \exp\left(-\frac{W}{kT}\right) \exp\left(-\frac{q}{kT}(\phi_{j-\frac{1}{2}} - \phi_j)\right) \end{aligned}\right\}$$

$$\cdots\cdots (7-26)$$

となるが，ここでは電子に対する電導であるので，(7－26)式を電子の拡散定数Dを用いて次のように置き換えて考える。

$$\left.\begin{aligned} \omega_{j,j+1} &= \frac{D}{\Delta r_j^2} \exp\left(-\frac{q}{kT}(\phi_{j+\frac{1}{2}} - \phi_j)\right) = \frac{D}{\Delta r_j^2} \exp\left(\frac{E_j \Delta r_j}{2kT}\right) \\ \omega_{j,j-1} &= \frac{D}{\Delta r_j^2} \exp\left(-\frac{q}{kT}(\phi_{j-\frac{1}{2}} - \phi_j)\right) = \frac{D}{\Delta r_j^2} \exp\left(-\frac{E_j \Delta r_j}{2kT}\right) \end{aligned}\right\}$$

$$\cdots\cdots (7-27)$$

ただし，Δr_j はj番目の領域の間隔である。また，ϕ_j，E_j は平行平板の場合と異なり円筒座標系における値を用いなければならない。それらの結果は付録 に整理しておいた。

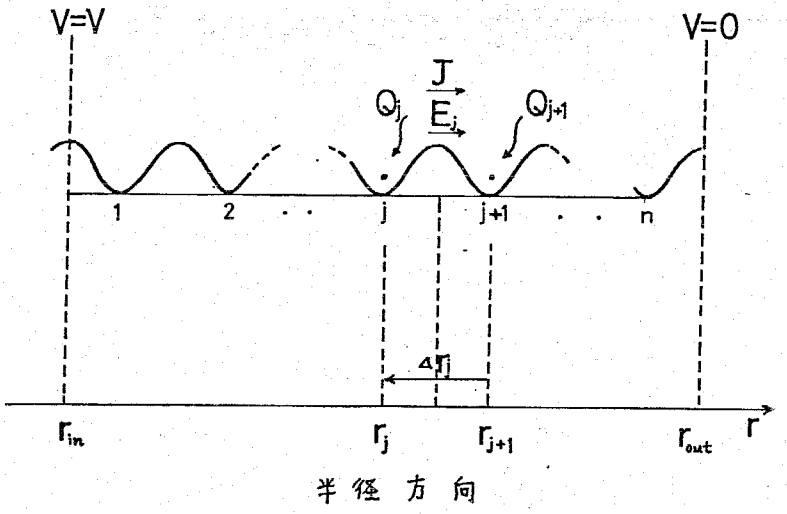
以上述べてきたように（7－25）式が電荷の挙動を示す基本式であるが，この式は第2章で扱かった一次元の基本式と同様である。このことは前述したように問題が一次元に還元されたことを意味し興味深い。

さて，ケーブル内に形成される電荷分布を決定する問題は，（7－25）式の時間項を零と置き定常状態の扱かいをすることで解決できる。その場合，第7－18図を用いれば，前節と全く同様な定常分布を決定するための基本式が導かれる。まず，jからj＋1番目のポテンシャル井戸に流れる電流Jは，

$$J = e\omega_{j,j+1} Q_j - e\omega_{j+1,j} Q_{j+1} \quad \cdots\cdots (7-28)$$

境界条件を定めるn番目のポテンシャル井戸より1番目のポテンシャル井戸へポテンシャルVの障壁を乗り越えて流れる電流は，

$$J = e\omega_{n,1} Q_n - e\omega_{1,n} \exp\left(-\frac{eV}{kT}\right) Q_1 \quad \cdots\cdots (7-29)$$



第7－18図　ケーブル絶縁体中の電荷の挙動

また，トラップの深さは浅いとして，電導電子Q_jとトラップ電子Q_tの間の関係式として，

$$\frac{Q_j}{Q_t} = \theta \quad (=一定) \quad \cdots\cdots (7-30)$$

さらに，円筒座標系でのGaussの法則より，第7－18図を参照して，

$$(r_j + \Delta r_j) E_j - (r_j - \Delta r_{j-1}) E_{j-1} = \frac{e}{2\pi\varepsilon}\left(Q_j + \frac{Q_j}{\theta}\right)$$

$$\simeq \frac{e\,Q_j}{2\pi\varepsilon\theta} \qquad \cdots\cdots (7-31)$$

なる電界の関係式を得る。

以上，(7－28)～(7－31)式で与えられる基本関係式を用いれば，前節同様に内径あるいは外径における電界$E(r_{in})$，$E(r_{out})$が求められたとして試料内の電荷分布を定められる。

計算手順は前節と全く同様であり，$E(r_{out}) = E_n$が既知とすれば第7－19図のように整理される。ただし，計算では$\Delta r_j = \Delta r$（＝一定）として次のように換算された諸量を用いている。

電流に対しては，

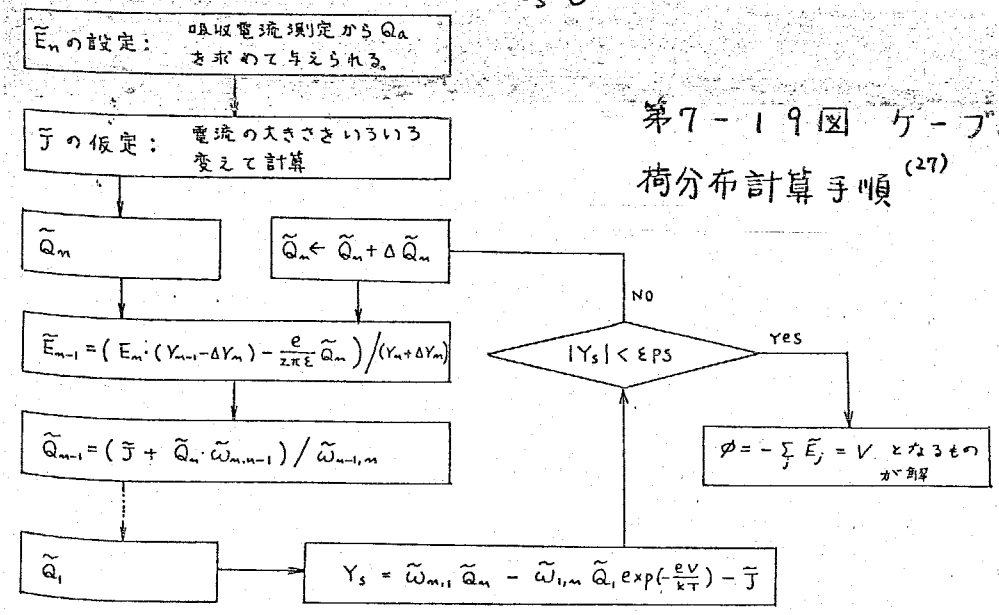
$$\tilde{J} = \frac{J(\Delta r)^3}{e\varepsilon_s D\theta} \qquad \cdots\cdots (7-32)$$

電界に対しては，

$$\tilde{E}_j = E_j \Delta r \qquad \cdots\cdots (7-33)$$

電荷に対しては，

$$\tilde{Q}_j = \frac{Q_j \Delta r}{\varepsilon_s \theta} \qquad \cdots\cdots (7-34)$$



第7－19図　ケーブル絶縁体中の電荷分布計算手順[27]

実際の計算では，ケーブルのように厚い絶縁体の場合を扱かうのであるから，第7－1，2表のように諸量をSで換算して用いなければならない。すなわち，(7-32)～(7-34)式をSによって次のように変換して用いる。このことは，$S\Delta r$なる区間で電位を直線近似することを意味している。

$$\tilde{J} = \frac{SJ}{eS^2 D\theta\varepsilon_s}(\Delta r)^3 \qquad \cdots\cdots(7-35)$$

$$\tilde{E}_{k'} = \frac{E_{k'}}{S}(S\Delta r) \qquad \cdots\cdots(7-36)$$

$$\tilde{Q}_{k'} = \frac{Q_k}{\varepsilon_s\theta}(S\Delta r) \qquad \cdots\cdots(7-37)$$

以上で電荷分布を決定する手順が整ったが，問題は界面の電界$E_{out}=E_m$をあらかじめ定めることである。前節では吸収電流測定に適用して求めたが，このことはケーブル絶縁体においても同様で以下のようである。

吸収電流をI_aとすれば，その吸収電荷量は対向電極面に誘起される電荷量と対応して，

$$\int_0^\infty I_a\,dt = \varepsilon 2\pi r_{out} E(r_{out})\Big|_{V=0} \qquad \cdots\cdots(7-38)$$

なる関係式が成立する。従って，電極界面（外径）$r=r_{out}(=r_m)$における電界$E(r_{out})$は，$E(r_{out})|_{V=0}$と印加電圧Vとの重ね合わせとして，付録6を参照して次のように定められる。

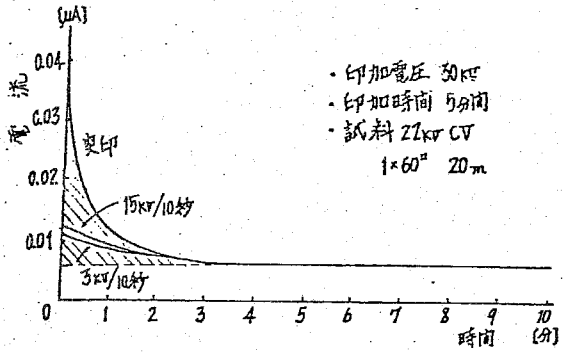
$$E(r_{out}) = E_m = \frac{\int_0^\infty I_a\,dt}{2\pi\varepsilon r_{out}} + \frac{V}{r_{out}}\cdot\frac{1}{\ln r_{in}/r_{out}} \qquad \cdots\cdots(7-39)$$

よって，まず吸収電流を測定して吸収電荷量を求め，(7－39)式からE_mを定める。次に，第7－19図に示された計算手順に従って計算を行なう。こ

のようにして試料内電荷分布を定められることが明らかとなった。

<7－8－2> ケーブル試料についての計算例

C－Vケーブルについての充電々流の測定結果第7－20図を用いて実際の計算を試みた。計算に用いられた諸元は第7－4表に示す通りである。



7－20図 C－Vケーブルの充電々流(49)

内径 r_{in}	12 mm
外径 r_{out}	18 mm
印加電圧 V	-30 kV
比誘電率 ε_s	2.3
温度 T	300 K
ケーブルの長さ	20 m
吸収電荷量	5.63×10^{-10} C/cm

第7－4表 ケーブルの計算に用いられた諸元

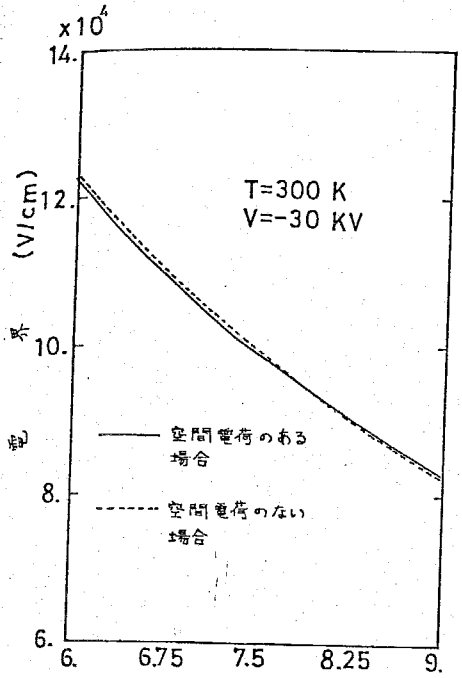
計算に用いられたSの値は 10^5 で，第7－20図の斜線部分の面積より求めた吸収電荷量 Q_a $\left(=\int_0^\infty I_a\,dt\right)$ は，5.63×10^{-10} C/cmであった。

第7－21図は，内導体系より電荷の注入があるとして計算した試料内の電界分布であり，結果は空間電荷のない場合と比較すれば注入電極界面（Y_{in}）付近で若干の電界緩和がみられる程度である。第7－22図は，その場合の電位分布の計算結果で，第7－23図が同じくその場合の電荷分布である。

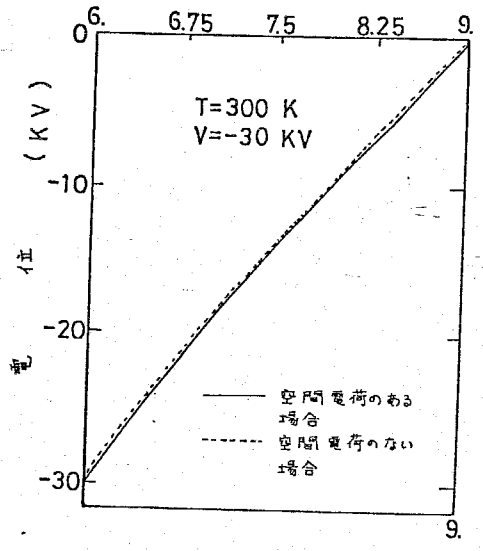
<7－8－3> 検討

前節までに述べたように，試料内の電荷分布を求められることが明らかとなった。ところで実際のケーブルでは，もれ電流が流れる結果試料内ではジュール熱の発生を伴なう。その場合には，試料内の温度勾配も考慮されねばならない。この温度勾配は，試料内半径Yの位置における温度をT(Y)として，熱伝導方程式

$$\nabla^2 T(r) = 0 \qquad \cdots\cdots(7-40)$$



第7-21図 ケーブル絶縁体中の電界分布の計算例



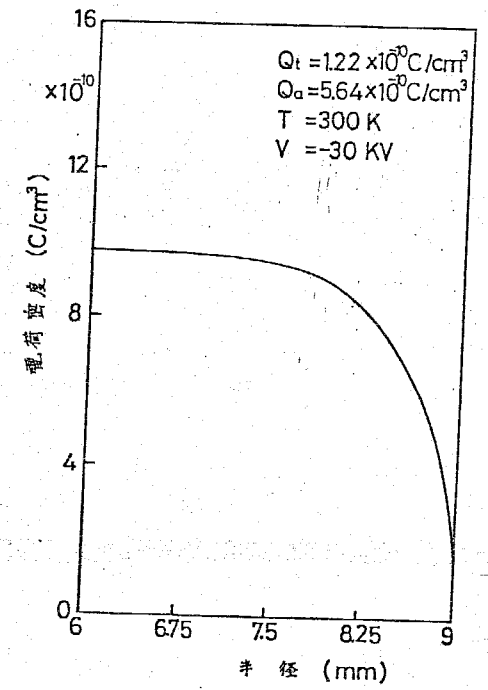
第7-22図 ケーブル絶縁体中の電位分布の計算例

を解くことにより求められる。すなわち，$r=r_{in}$，$r=r_{out}$での温度をT_{in}，T_{out}として，

$$T(r)=T(r_{in})-(T(r_{in})-T(r_{out}))\times\frac{\ln(T(r)/T(r_{in}))}{\ln T(r_{out})/T(r_{in})} \quad \cdots\cdots(7-41)$$

与えられる。

この場合，$T(r_{in})$，$T(r_{out})$は測定できる量である。そして，試料の電導を支配する電流の活性化エネルギーをH_Dとすれば，拡散定数は次のようになる。



第7-23図 ケーブル絶縁体中の電荷分布の計算例

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{H_D}{kT}\right) \qquad \cdots\cdots (7-42)$$

よって，(7-42)式を(7-28)式の基本電流式に代入してゆけば温度勾配の効果を考慮できることになる。その結果は，(7-35)式でDをD。として，(7-28)式中の$\omega_{j,j+1}$なる遷移確率の項を，$\omega_{j,j+1}\cdot\exp(-\frac{H_D}{kT})$として考えればよい。

以上のようにホッピング数値計算法に従えば，ケーブルのような熱伝導現象を含む場合も容易に扱えることになり，工学的応用は非常に広いと考えられる。

7-9 まとめ

本章の前半では，吸収電流の実測値を用いてホッピング数値解析を行ない，絶縁体中の空間電荷分布などの空間電荷特性や導電特性を計算する方法を示し，ポリエチレンフィルムに対してその適用を試みた。その結果，この計算例と実測結果とを比較して本数値計算法の有効性を示した。さらに，数値解析よりポリエチレン中の電子の実効移動度や注入電極界面電界と電流の関係も求められた。

本章の後半では，前半で得られた結果よりホッピング数値計算法の応用例を示した。まず第1に，厚さの異なるポリエチレンフィルムについてホッピング数値計算法を適用し，この数値計算によって空間電荷特性や電流-電圧特性を評価できることを確かめると同時に，実効移動度と電極面における電流注入特性を用いてホッピング数値計算法より空間電荷特性や電流-電圧特性を求めうることを示した。このことは，ある厚さの試料について実効移動度と電流注入特性を求めておけば厚さの異なる試料のみならず各種形状の試料の特性も評価できることを示している。第2に，実用機器であるケーブルに対して吸収電流測定を行ない，それをもとにしてホッピング数値計算法からその電荷分布を決定する問題を扱かった。

第8章　過渡電子伝導現象の解析に関する研究

8-1　まえがき[52)~54)]

第7章では，定常状態についての電子伝導現象をホッピング数値計算法を用いて解析し，試料の一部，例えば電極界面における電界が知れれば，拡散と空間電荷電界を同時に考慮して試料内の注入電荷分布などの空間電荷特性を評価できることを明らかにした。そして，吸収電流測定を行ない吸収電荷量を求めておけば注入電極面と反対の対向電極面における電界が算出されることから，これを利用した空間電荷特性の解析法とその実例を示した。

一方，吸収電流でもみられるように，測定時に観測される過渡電流特性は絶縁体試料中における電子（正孔）の挙動やトラップなど材料の性質を反映しているものと考えられ，今迄に多くの研究が行なわれている。[52)~54)]本章では，このような過渡状態における電子伝導の問題を扱かう。この問題は，すでに注入電極界面の電界が零の場合については拡散を無視して理論解析されている。[17)52)]しかし，注入電極界面における電界が零でない場合や，拡散を効果を考慮した場合について解析的に扱かうことができないのは定常状態の場合と同様である。

本章ではこのような観点から，まず，電子伝導現象の定常解析に有効であったホッピング数値計算法を用いて，拡散と空間電荷の効果を同時に考慮した場合の過渡空間電荷制限電流の解析を試みる。ただし，ホッピング数値計算法の過渡解析に対する有効性を示すため，従来より過渡解析が比較的よく行なわれている注入電極面の電界を零とした場合について記述する。そして，拡散を無視した場合の計算結果と比較する。

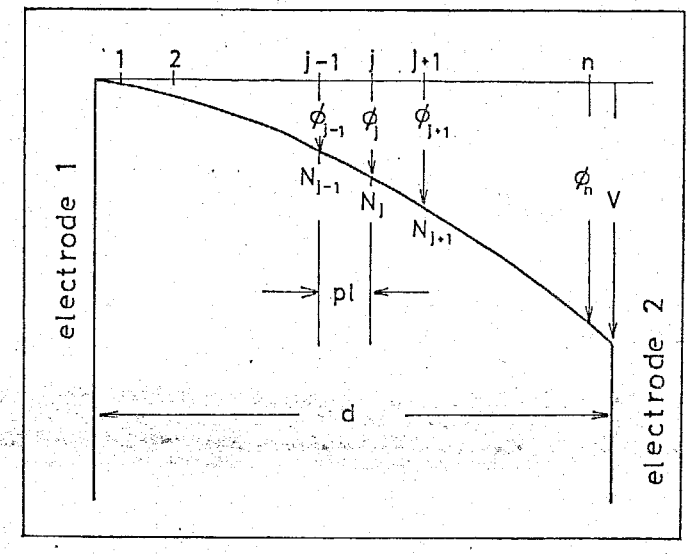
次いで，過渡解析の応用として電荷減衰の問題を扱かう。過渡電荷減衰特性は，試料内におけるキャリアの挙動と密接に関係していると考えられ，キャリアの移動度を測定する手段としても用いられて今迄に多くの研究がなされている。[55)~63)]その中で，高分子フィルムをコロナ放電により帯電し，その時間特性を調べると，放電々圧の高い場合ほど速く減衰し，その上低い電圧で定常となるこ

とが知られている。[55],[56] この現象は「交叉現象」と呼ばれているが，この原因については不明な点も多く完全に説明できるものではない。本章では，この特異現象に対してホッピング数値計算法により解析を試みる。その結果，複雑な機構を考えなくても現象がある程度説明できることを示す。

8－2　過渡空間電荷制限電流に対するホッピング数値計算法の扱い

＜8－2－1＞　ホッピング数値計算法の基本式

第6章で詳しく述べたように，イオン空間電荷分極の解析に用いたイオンホッピングモデルで，ホッピング距離ℓが無限小となった場合が，ドリフトと拡散による電子伝導を記述するモデルに相当するが，数値解析においては有限の距離$p\ell$（pは無限大）でℓが無限小の場合の等価計算が行なわれる。第8－1図は，このような等価計算をする場合の試料内部における電荷分布と電位分布を示している。図中，電極1より1，2，・・・，nで番号付けられた位置，例えばj番目の位置にはN_j個の電子が存在するとし，その位置の電位は空間電荷及び試料に加える印加電圧によって定まりϕ_jとする。このようなモデルで各位置における粒子の運動を記述すれば次のようである。



第8－1図　電子伝導現象に対する試料の分割と試料内の荷電粒子の位置及び電位

$$\frac{d}{dt}N_1 = -\omega_{1,2}N_1 + \omega_{2,1}N_2 + \frac{J_{in}}{e}$$

$$\frac{d}{dt}N_j = \omega_{j-1,j}\,N_{j-1} - (\omega_{j,j-1} + \omega_{j,j+1})\,N_j + \omega_{j+1,j}\,N_{j+1} \quad (j = 2, 3, \cdots, n-1)$$

$$\frac{d}{dt}N_n = \omega_{n-1,n}\,N_{n-1} - \omega_{n,n-1}\,N_n - \frac{J_{out}}{e} \quad \cdots\cdots (8-1)$$

ここで，(8－1)式中，J_{in}/eは電極1より単位時間に注入される電子数を，J_{out}/eは試料より電極2を通して流出する電子数を表わしている。このような電極面を通しての電荷の移動があることが電子伝導の特徴である。そして，J_{in}/eは電極1から試料への注入機構によって定まり，J_{out}/eは試料から電極2への流出機構によって定まる。以上のように，(8－1)式は絶縁体中のトラップのない場合の拡散と空間電荷電界によるドリフトで定まる電子伝導を記述する一般的な方程式と考えられる。なお，(8－1)式で表わされた基本式に拡散と空間電荷電界の効果が同時に入っていることは既に述べた通りである。

さて，ここでは常に注入電極界面の電界が零となるような場合を考えるので，J_{in}/eとしてはこのような条件を満足する関係式を求めなければならない。この関係式は次のように置き換えて考えることができる。すなわち，第8－1図において試料内部の電界が印加電圧と注入電荷によって定まるとすれば，電極1の界面における電界E_0はポアソンの式を解くことによって得られ，

$$E_0 = -\frac{V}{d} - \frac{e}{\varepsilon_0 \varepsilon_s d}\sum_{i=1}^{n}\left(n - i + \frac{1}{2}\right)(N_i p l) \quad \cdots\cdots (8-2)$$

ただし，dは試料の厚さ，ε_0は真空誘電率，ε_sは試料の比誘電率である。

(8－2)式より，$E_0 = 0$とすれば，

$$N_1 = \frac{1}{(n-0.5)\,p\,l}\left\{-\frac{\varepsilon_0 \varepsilon_s}{e}V - \sum_{i=2}^{n}\left(n - i + \frac{1}{2}\right)N_i p l\right\}$$

・・・・・（8－3）

となるが，この関係式は過渡状態のいかなる時点においても成り立つものである。従って，注入電極界面の電界が零となる条件は（8－3）式により置き換えて考えることができる。このことは，（8－1）式の第1式の代わりに（8－3）式を用いてよいことを示している。よって，以後は（8－3）式で（8－1）式の第一式を置き換えて記述する。また，J_{out}/eは試料より電子の流出する機構によって定まるが，この条件としては今迄に第6，7章の定常状態の解析に用いた関係式

$$\frac{J_{out}}{e} = \omega_{n,n+1} N_n - \omega_{1,0} N_1 \exp\left(-\frac{eV}{kT}\right)$$

・・・・・（8－4）

を用いる。

以上述べたように，（8－1），（8－3），（8－4）式が注入電極界面の電界が零の条件における過渡電流特性を数値解析する式となるが，これらを再びまとめて示せば，

$$N_1 = \frac{1}{(n-0.5)p\ell}\left\{-\frac{\varepsilon_0 \varepsilon_s}{e}V - \sum_{i=2}^{n}\left(n-i+\frac{1}{2}\right)N_i p\ell\right\}$$

・・・・・（8－5）

$$\frac{d}{dt}N_j = \omega_{j-1,j} N_{j-1} - (\omega_{j,j-1} + \omega_{j,j+1}) N_j + \omega_{j+1,j} N_{j+1} \quad (j=2,3,\cdots,n-1)$$

・・・・・（8－6）

$$\frac{d}{dt}N_n = \omega_{n-1,n} N_{n-1} - \omega_{n,n-1} N_n - J_{out}/e$$

・・・・・（8－7）

$$\frac{J_{out}}{e} = \omega_{n,n+1} N_n - \omega_{1,0} N_1 \exp\left(-\frac{eV}{kT}\right) \quad \cdots\cdots (8-8)$$

さらに，上式中の電子の遷移確率 $\omega_{j,j+1}$, $\omega_{j+1,j}$ については，第6章で述べたように無限小の ℓ に対して次のように近似して表わすことができる。

$$\omega_{j,j+1} = \frac{D}{(p\ell)^2}\left\{1 - \frac{e}{kT}(\phi_{j+\frac{1}{2}} - \phi_j)\right\}$$

$$= \frac{D}{(p\ell)^2}\left(1 + \frac{1}{2kT} E_j \cdot p\ell\right)$$

$$\omega_{j,j-1} = \frac{D}{(p\ell)^2}\left\{1 - \frac{e}{kT}(\phi_{j-\frac{1}{2}} - \phi_j)\right\}$$

$$= \frac{D}{(p\ell)^2}\left(1 - \frac{1}{2kT} E_{j-1} \cdot p\ell\right)$$

$\cdots\cdots (8-9)$

ただし，Dは電子の拡散定数，E_j は電界である。また，(8-9)式中の E_j と ϕ_j はポアソンの式から次式で示される。

$$E_j = -\frac{V}{d} + \frac{e(p\ell)}{\varepsilon_0 \varepsilon_s d}\left\{\sum_{i=1}^{j}\left(i - \frac{1}{2}\right) N_i - \sum_{i=j+1}^{n}\left(n - i + \frac{1}{2}\right) N_i\right\}$$

$\cdots\cdots (8-10)$

$$\phi_j = -\sum_{i=1}^{j-1} E_i \cdot p\ell \quad \cdots\cdots (8-11)$$

以上のように，(8-5)～(8-11)式は N_j の時間変化に関する連立微分方程式となり，この中で(8-5)式が注入電極面電界を零としたときの境界条件である。従って，この条件を満足するように上記連立微分方程式を数値解析すれば，注入電子の試料内での空間的な電荷分布の時間変化が求められ，(8-10)，(8-11)式によって電界分布，電位分布の時間変化も定められる。さらに，<8-2-3>で記述するように過渡電流特性も知られる。

このような過渡計算は，イオン過渡電流の解析の場合と同様にRunge-kutta法を用いて行なうことができる。ただし，実際の計算では<8-2-2>で述べるように諸量は規格化される。なお，上記の式中の時間微分項を零とおけば，

$$\omega_{j-1,j} N_{j-1} - \omega_{j,j+1} N_j = \omega_{j,j+1} N_j - \omega_{j+1,j} N_{j+1}$$

$$= \frac{J_j}{e} = \frac{J_{in}}{e} = \frac{J_{out}}{e} \qquad \cdots\cdots (8-12)$$

となる。(8-12)式は定常電流を示すことになり，第6章で解析に用いた基本式と一致している。

<8-2-2> 基本式の規格化

まず，電子数N_jの規格化は次のように行なわれる。試料の容量C($=\varepsilon_0\varepsilon_s/d$)によって充電される電荷量$Q_0$($=CV$)を電子の電荷eで除した電子数を$N_0$とする。すなわち，

$$N_0 = \frac{CV}{e} = \frac{\varepsilon_0\varepsilon_s}{ed} V \qquad \cdots\cdots (8-13)$$

とする。そして，次のような$\tilde{N}_j$を規格化された電子数とする。

$$\tilde{N}_j = \frac{N_j}{N_0} = N_j \frac{ed}{\varepsilon_0\varepsilon_s V} \qquad \cdots\cdots (8-14)$$

電子の遷移確率については次のような規化された量$\tilde{\omega}_{j,j+1}$，$\tilde{\omega}_{j,j-1}$を取りあげる。

$$\left.\begin{aligned} \tilde{\omega}_{j,j+1} &= 1 + \frac{\tilde{E}_j}{2kT} \\ \tilde{\omega}_{j,j-1} &= 1 - \frac{\tilde{E}_{j-1}}{2kT} \end{aligned}\right\} \qquad \cdots\cdots (8-15)$$

ただし，上式中の規格化された電界$\tilde{E}_j$は次のような量である。

$$\tilde{E}_j = E_j \cdot p\ell \qquad \cdots\cdots (8-16)$$

また，時間については次式のように $\tilde{\tau}$ で規格化する。

$$\tilde{t} = t\,\frac{D}{(p\ell)^2} = \frac{t}{\tilde{\tau}} \quad , \quad \frac{1}{\tilde{\tau}} = \frac{D}{(p\ell)^2} \qquad \cdots\cdots (8-17)$$

このように（8－14），（8－17）式によって諸量を規格化すれば，（8－5）～（8－10）式は次のように書ける。

$$\tilde{N}_1 = \frac{n}{n-0.5} - \sum_{i=2}^{n} \frac{n-i-0.5}{n-0.5}\,\tilde{N}_i \quad \cdots (8-18)$$

$$\frac{d}{d\tilde{t}}\tilde{N}_j = \tilde{\omega}_{j-1,j}\,\tilde{N}_{j-1} - (\tilde{\omega}_{j,j-1} + \tilde{\omega}_{j,j+1})\,\tilde{N}_j + \tilde{\omega}_{j+1,j}\,\tilde{N}_{j+1} \quad (j = 2, 3, \cdots, n-1)$$

$$\cdots\cdots (8-19)$$

$$\frac{d}{d\tilde{t}}\tilde{N}_n = \tilde{\omega}_{n-1,n}\,\tilde{N}_{n-1} - (\tilde{\omega}_{n,n-1} + \tilde{\omega}_{n,n+1})\,\tilde{N}_n + \tilde{\omega}_{1,0}\exp\left(-\frac{eV}{kT}\right)\tilde{N}_1 \qquad \cdots\cdots (8-20)$$

$$\left.\begin{aligned} \tilde{\omega}_{j,j+1} &= 1 + \frac{\tilde{E}_j}{2kT} \\ \tilde{\omega}_{j,j-1} &= 1 - \frac{\tilde{E}_{j-1}}{2kT} \end{aligned}\right\} \cdots\cdots (8-21)$$

$$\tilde{E}_j = E_j \cdot p\ell$$

$$= -\frac{V}{n} + \frac{e}{\varepsilon_0}\left\{\sum_{i=1}^{j}\frac{i-0.5}{n}\tilde{N}_i - \sum_{i=j+1}^{n}\frac{n-i+0.5}{n}\tilde{N}_i\right\}\frac{N_0 p\ell}{\varepsilon_s}$$

$$\cdots\cdots (8-22)$$

<8－2－3> 外部回路を流れる電流

<8－2－2>で得られた基本式（8－18）～（8－22）式を用いて$\tilde{N}_j$の時間変化が求められ，これによって外部回路を流れる電流を算出できる。すなわち，この電流は外部回路から試料に流入する電流であり，（8－1）式のJ_{in}にあたるが，これは変位電流と伝導電流の和である。前者は試料内に存在する電荷の時間微分であらわされ，後者は対向電極から流れ出る電流J_{out}である。すなわち，この外部回路電流をIとすれば次のように表わされる。

$$J_{in} = I = \frac{d}{dt}\int_0^d \frac{x}{d}\rho(x,t)\,dx + J_{out} \qquad \cdots\cdots (8-23)$$

ただし，$\rho(x,t)$は時間tにおける電荷密度である。第8－1図を参照して上式の積分をn個の区間に分けて書き換え，（8－8），（8－9），（8－15）式を用いてJ_{out}を表わし，Iを規格化すると，

$$\tilde{I} = \sum_{i=1}^{n} \frac{i-0.5}{n}\frac{d}{dt}\tilde{N}_i + \left(1+\frac{\tilde{E}_n}{2kT}\right)\tilde{N}_n - \left(1-\frac{\tilde{E}_0}{2kT}\right)\exp\left(-\frac{eV}{kT}\right)\tilde{N}_1 \qquad \cdots\cdots (8-24)$$

ただし，

$$\tilde{I} = \frac{I(p\ell)^3}{e\varepsilon_s D} = \frac{I}{e\varepsilon_s D}\left(\frac{d}{n}\right)^3 \qquad \cdots\cdots (8-25)$$

である。

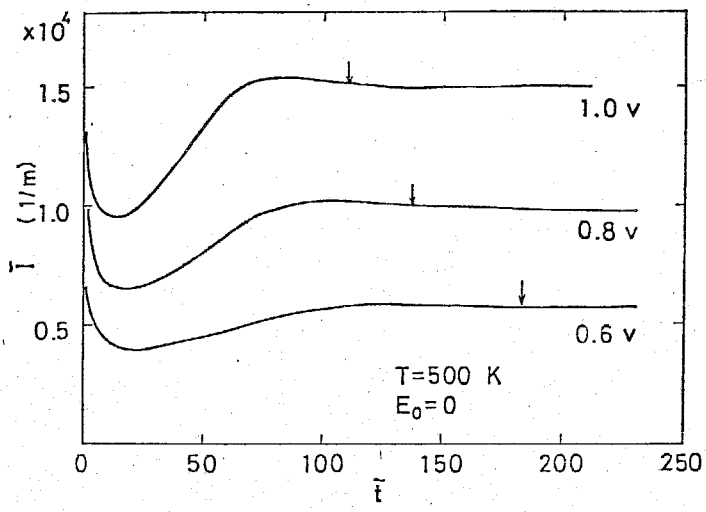
8－3 数値解析例

前節で得られた基本式を用いて注入電極界面の電界が零の場合の数値解析を行なった。第8－2図は本数値計算で得られた過渡電流特性を示している。計算条件は，T＝500k，試料の分割数nを50とした。同図より，電流は初

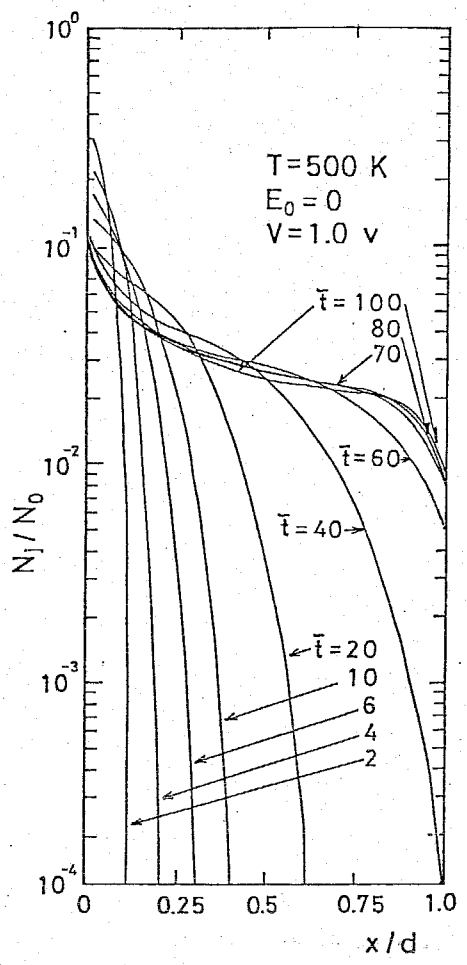
期に減少し，その後電流ピークを生じて流れることがわかる。この初期における電流の減少する部分は拡散を無視した従来の理論計算においては現われないもので，拡散による効果と考えられるが，後にこの点について更に検討する。

第8－3図は，試料への印加電圧Vを1vとした場合の試料内の注入電荷の挙動を示している。同図より電荷は電極1より内部に注入されてゆく様子が明らかとなるが，V＝1Vとした場合に電流ピークを生ずる時間は$\tilde{t}$＝84．7であり，注入電荷の先端が電極2に到達するときにほぼ等しいことがわかる。このことはイオン過渡電流を解析した第4章の結果と同様である。また，その他種々の電圧を印加した場合も同様の結果が得られる。

第8－4図は，試料に注入された全電荷量の時間変化を示している。計算値は，時間$\tilde{t}$で注入されている電荷量をQ($\tilde{t}$)



第8－2図　過渡空間電荷制限電流の計算例

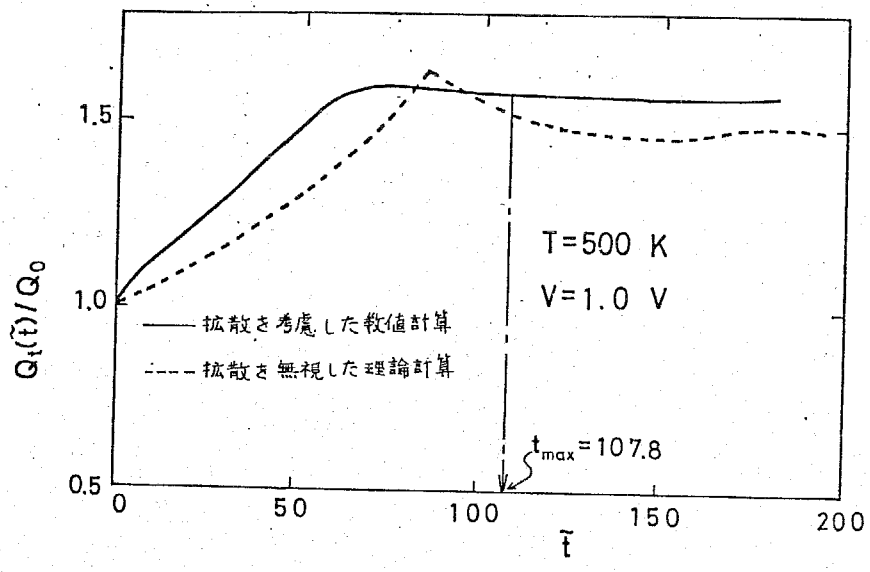


第8－3図　試料内における注入電荷の挙動

として次のようである。

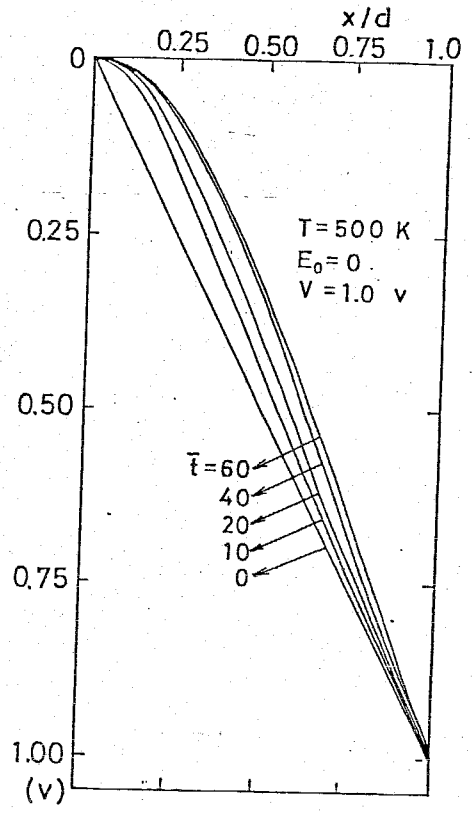
$$\frac{Q_t(\tilde{t})}{Q_0} = \sum_{j=1}^{n} \frac{eN_j}{Q_0} \quad \cdots\cdots (8-26)$$

ただし，$Q_0 = eN_0$ である。同図には本数値計算で得られ結果を実線で，後に述べる従来の拡散を無視したいわゆるSCLCの理論解析の結果を点線で示したが，両者の間には特性の差がみられる。[17] これも後に記述するように拡散の効果と考えられるが，従来の計算では時間領域を分割しているために折れ曲がりを生じる。



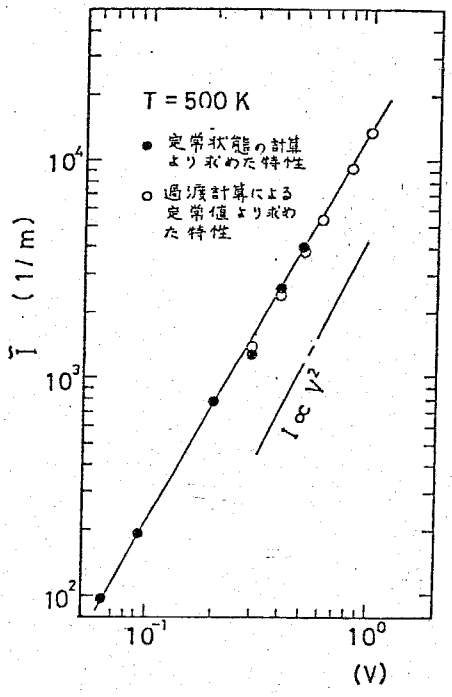
第8－4図　過渡空間電荷制限電流における試料内注入電荷量の時間変化（拡散を考慮した場合の数値計算と拡散を無視した理論解析との比較）

第8－5図は，$V = 1V$ とした場合の試料内の電位の時間変化を示している。同図より，時間と共に電極界面（注入側）で電界が緩和されてゆくことがわかる。以上，第8－2～8－5図より注入電極界面の電界を零とした場合の過渡空間電荷制限電流の解析を行うことができることが明らかとなった。



第8－6図はこのような過渡電流特　第8－5図　試料内の電位変化の様子

性から，電流が定常に落ち着いた時に流れる電流-電圧の関係を求め，（8－12）式を用いた第6章の定常状態からの数値計算の手順に従って求めた同特性とを比較したものである。両者は，本数値計算のモデルから考えて当然一致しなければならないものであるが，同図よりよく一致している。このことから，過渡計算によっても試料内の定常分布を求められることがわかる。



第8－6図　過渡計算からの定常値より求めた電流-電圧特性と定常状態の計算から求めた同特性の比較

8－4　過渡空間電荷制限電流についての検討

<8－4－1>拡散の効果を無視した計算との比較

前節までで，拡散の効果と空間電荷電界を同時に考慮して過渡空間電荷制限電流の数値解析を行なうことができることが明らかとなった。しかし，その結果は第8－2図の電流-時間特性にも見られるように，従来の拡散を無視した場合に得られるものとは異なっている。これは拡散を無視したことに原因があると考えられるが，ホッピング数値計算法を確認するためにも，従来の拡散を無視した場合に対応させて（8－1）式より拡散を無視した場合の式を導き，電流-時間特性の比較を試みる。

（8－1）式より，j番目の位置における粒子の挙動を示す式を（8－9）式を用いて書き下せば，

$$\frac{d}{dt}N_j = \omega_{j-1,j}\,N_{j-1} - (\omega_{j,j-1} + \omega_{j,j+1})\,N_j + \omega_{j+1,j}\,N_{j+1}$$

$$= \frac{D}{(p\ell)^2}\left(1+\frac{E_{j-1}\cdot p\ell}{2kT}\right)N_{j-1} - \frac{D}{(p\ell)^2}\left(1-\frac{E_{j-1}\cdot p\ell}{2kT}\right)N_j$$

$$- \frac{D}{(p\ell)^2}\left(1+\frac{E_j\cdot p\ell}{2kT}\right)N_j + \frac{D}{(p\ell)^2}\left(1-\frac{E_j\cdot p\ell}{2kT}\right)N_{j+1}$$

$$= \frac{D}{(p\ell)^2}(N_{j-1}-N_j) - \frac{D}{(p\ell)^2}(N_j-N_{j+1})$$

$$+ \frac{D}{(p\ell)^2}\frac{E_{j-1}\cdot p\ell}{kT}\cdot\frac{N_{j-1}+N_j}{2} - \frac{D}{(p\ell)^2}\frac{E_j\cdot p\ell}{kT}\cdot\frac{N_j+N_{j+1}}{2}$$

・・・・・(8-27)

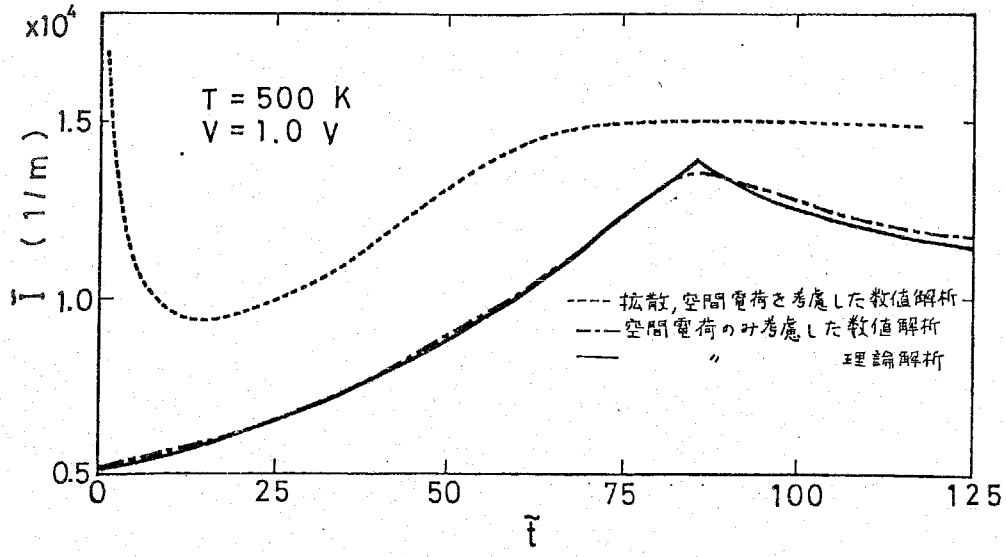
となるが，(8-27)式の前二項は，それぞれj-1番目とj番目，j番目とj+1番目における粒子の差を表わしており，拡散の効果を示しているものと考えられる。そこで，(8-27)式よりこの効果を消去すれば，ホッピング数値計算法における拡散を無視した基本式として，

$$\frac{d}{d\tilde{t}}\tilde{N}_j = \frac{\tilde{E}_{j-1}}{kT}\cdot\frac{\tilde{N}_{j-1}+\tilde{N}_j}{2} - \frac{\tilde{E}_j}{kT}\cdot\frac{\tilde{N}_j+\tilde{N}_{j+1}}{2}$$

・・・・・(8-28)

が得られる。ただし，(8-28)式には(8-14)～(8-17)式の変換が用いられている。

第8-7図は，(8-28)式を用いて連立微分方程式を解き拡散を無視して計算を行なった結果を示している。図中，一点鎖線で示された曲線が(8-28)式による結果である。同図には，従来よりMamy氏らによって理論解析されている結果を実線で示したが，両者はよく一致しており，しかも(8-28)式による数値計算では全時間領域で一貫して計算されているために従来の理論計算にみられる電流曲線の折れ曲りは生じない。[52] このように本数値計算による結果は理論計算とほとんど一致することから，第8-2図で示される拡散の効果の入った計算の結果も正しいものを示していると考えられる。一方，同図中に示した点線は拡散と空間電荷電界を同時に考慮した場合に計算される

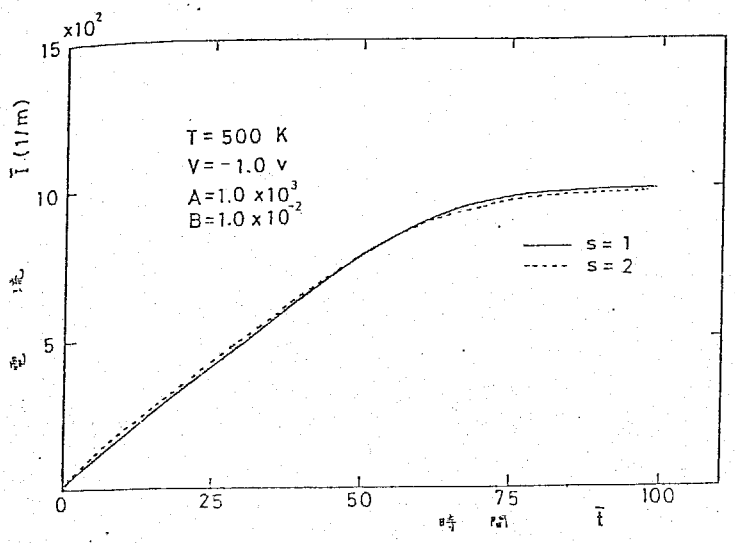


第8－7図　過渡空間電荷制限電流の拡散を無視した理論計算，
ホッピング数値計算法を用いての拡散を無視した計算例
及び拡散を考慮した計算例

結果であるが，拡散の効果が加わるため上述の計算結果とは異なっている。以上のことから，拡散の効果は，まず初期において電流が急激に減少する結果となって現われるものと考えられる。そして，定常状態においても拡散電流による分だけ増加した電流が流れることも同図より推定される。この結果は既に第6章で空間電荷制限電流の定常解析をした際に報告している。しかし実験結果では初期における電流の急激な減少はみられない。このことは注入電極面電界を零とした条件が問題であって，この電界を零でないとすれば拡散を考慮してもこのような電流特性が得られないことを確かめられる。たとえば，注入電流特性として（8－1）式の J_{in}/e で示される式を

$$J_{in} = A \exp(B\sqrt{E_0}) \qquad \cdots\cdots (8-29)$$

として計算した結果を第8－8図に表わす。同図より，電流は漸増する特性であって，急激な減少をする特性とはならないことがわかる。ただし，E_0 は界面の電界を表わしている。



第8－8図
界面での注入電流特性を考慮した場合の過渡電流特性

<8－4－2> 電流ピーク発生時間[17]

過渡空間電荷制限電流にピークを生ずる現象があることは，今迄の研究や本章での第8－2，7図にもみられて明らかとなっている。そして，ピークを発生する時間t_pが絶縁体内部における電子の動きとの関係から研究されている。すなわち，空間電荷電界による効果と拡散による効果を無視した場合，電荷が試料間をドリフトして動く時間をt_0とすれば，キャリアの移動度をμ，印加電圧をV，試料の厚さをdとして，

$$t_0 = \frac{d^2}{\mu V} \qquad \cdots\cdots (8-30)$$

で与えられる。そして，この時間が両着の効果を無視した場合に現われるピーク時間t_pとなる。第8－2図中の矢印は，(8－30)式より得られる時間を示している。一方，空間電荷電界の効果のみ考慮に入れた場合には，理論解析からピーク時間t_pと(8－30)式のt_0の関係が明らかになっている。すなわち，

$$t_p = 2\left(1 - e^{-\frac{1}{2}}\right) t_0 = 0.786\, t_0 \qquad \cdots\cdots (8-31)$$

となる。

そこで，本章における数値解析により，空間電荷電界と拡散の両者の効果を同時に考慮に入れた場合のピーク発生時間t_pとt_0の関係を第8－2図で示される特性より求めて比較を試みる。

印加電圧 V(v)	t_0	拡散のみ無視した場合		空間電荷電界と拡散を考慮	
		t_p	t_p/t_0	t_p	t_p/t_0
0.2	539	423.65	0.786		
0.4	269.5	211.82	0.786		
0.6	179.67	141.22	0.786	135.0	0.751
0.8	134.75	105.91	0.786	99.0	0.735
1.0	107.8	84.73	0.786	82.0	0.795

第8－1表　電流ピーク発生時間の比較

t_0：空間電荷及び拡散の効果を無視した場合の電流ピーク発生時間

t_p：電流ピーク発生時間

第8－1表に空間電荷電界のみ考慮に入れた場合，空間電荷電界及び拡散の両者の効果を考慮に入れた場合を整理したが，同表よりピーク発生時間については拡散のあるなしにかかわらずほぼ同じであった。同様のことは試料に注入される電荷量の時間変化にもみられる。すなわち，空間電荷電界の効果のみを考慮に入れた場合に試料内に注入される電荷量が最大となる時間は，(8－30)式で与えられるが，両者の効果を考慮した場合は第8－4図における計算

印加電圧 V(v)	t_0	拡散のみ無視した場合		空間電荷電界と拡散を考慮	
		t_0	t_p/t_0	t_0	t_p/t_0
0.2	539	423.65	0.786		
0.4	269.5	211.82	0.786		
0.6	179.67	141.22	0.786	135.0	0.751
0.8	134.75	105.91	0.786	99.0	0.735
1.0	107.8	84.73	0.786	82.0	0.795

第8－2表　注入電荷量の最大となる時間の比較

t_0：空間電荷及び拡散の効果を無視した場合の注入電荷量の最大となる時間

t_p：注入電荷量の最大となる時間

結果より求められる。これを第8－2表に整理して示したが，電流ピーク発生時間同様に両者には差の少ないことがわかる。以上の結果は，通常の条件では従来の空間電荷制限電流で考えられているように，拡散が空間電荷電界による効果に比べて小さいためと思われる。

<8－4－3> 高電圧を印加した場合の扱い

空間電荷制限電流の定常状態を解析した際，厚い膜に高電圧を印加した場合には，数値計算途上で解でない所を通過する時に計算が困難となる場合のあることを示した。そして，解決策として，厚い試料に対する等価計算を考えた。同様のことは過渡計算の場合にも現われてくる。そこで，定常状態で導いた時と同様に，区間spℓ（s>0）でポテンシャル及び電荷分布の直線性を仮定した等価計算を考える。そのためには，基本的に各位置における電荷の変化がpℓで計算する場合とspℓで計算する場合とが等しくなると考えて計算すればよい。

すなわち，（8－18）～（8－20）式よりpℓで計算する場合には，（8－19）式でみるならばj番目の位置における粒子の時間変化は，

$$\frac{d}{d\tilde{t}}\tilde{N}_j = \tilde{\omega}_{j+1,j}\tilde{N}_{j-1} - \tilde{\omega}_{j,j-1}\tilde{N}_j - \tilde{\omega}_{j,j+1}\tilde{N}_j + \tilde{\omega}_{j+1,j}\tilde{N}_{j+1} \quad \cdots\cdots(8-32)$$

一方，spℓで計算する場合には，j番目と同じ位置kにおける粒子の変化割合が同じになるように考えればよく，第4章を参照して，

$$\frac{d}{d\tilde{t}}\frac{\tilde{N}_k'}{s} = \frac{\tilde{\omega}_{k-1,k}'}{s}\frac{\tilde{N}_{k-1}'}{s^2} - \frac{\tilde{\omega}_{k,k-1}'}{s}\cdot\frac{\tilde{N}_k'}{s^2} - \frac{\tilde{\omega}_{k,k+1}'}{s}\cdot\frac{\tilde{N}_k'}{s^2} + \frac{\tilde{\omega}_{k+1,k}'}{s}\cdot\frac{\tilde{N}_{k+1}'}{s^2} \quad \cdots\cdots(8-33)$$

なる基本式を用いて計算すればよい。ここで，$\tilde{N}_k'$，$\tilde{\omega}_{k,k+1}'$ は，

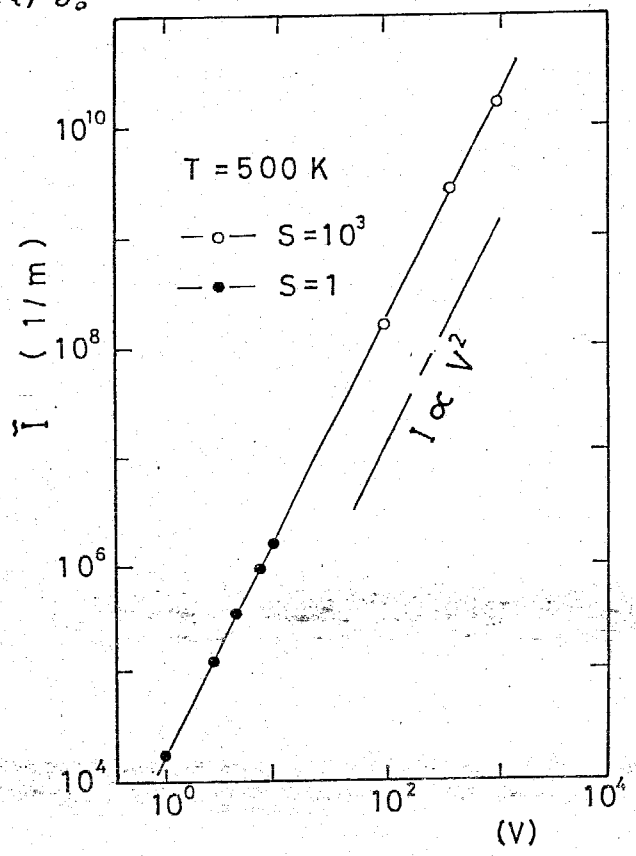
$$N_k' = \frac{N_k}{N_0} \quad , \quad \tilde{w}_{k,k+1}' = 1 + \frac{E_k(spl)}{2kT}$$

・・・・・(8-34)

である。ただし，数値計算を行なう場合には（8－33）式の両辺をS^3倍して計算することは，定常解析と同様である。

第8－9図には，（8－33）式により高電圧を印加した場合について計算した定常値のみ示した。計算は$S=10^3$として，印加電圧を1，00～1，000Vとした。その結果，第8－6図で示される電流～電圧特性の延長線上に定常電流値が現われることが示された。

以上より，高電圧印加の場合の特性も定常の時と同様の等価変換をして計算できることは明らかであろう。



第8－9図　高電圧印加の場合と低電圧印加の場合の電流・電圧特性の比較

8－5　電荷減衰現象の扱い[55)～(63)]

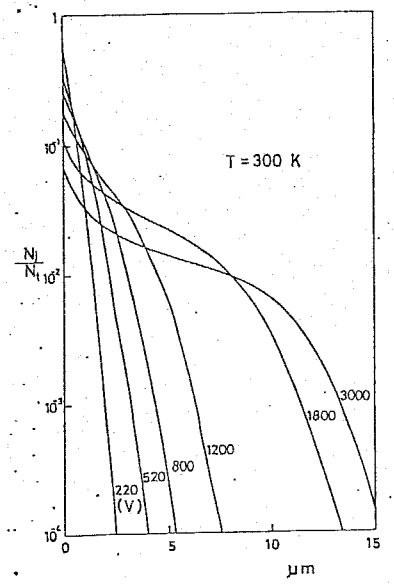
前節までで，ホッピング数値計算法を用いることで過渡電子電導現象が扱かえることが明らかとなった。本節では電荷減衰の問題についての同計算法の扱かいを示し，いわゆる「交叉現象」についてのシミュレーションを行なう。電荷減衰現象とは高分子フィルムを放電などによって帯電させた後，電荷が試料内を移動あるいは消滅する過程で，開回路によって表面電位を測定する際に観測される電位変化の様子を言う。この測定はキャリアの移動度を評価する手段として広く使用されている。その中で，高電圧で帯電させた試料程

速く減衰し，低電圧で帯電した場合よりもさらに低電位まで減衰する現象は「交叉現象」と呼ばれ，その異常さから多くの研究や報告がされている。ホッピング数値計算法はこうした問題も扱かえる可能性がある。そこで，単位時間当たりに一定量の電荷ΔQを注入する放電を模擬したモデルによって電荷減衰の問題を扱かった。そのためには，（8－1）式の第1式のJm/eをΔQ/e/Δt（Δtは単位時間）として，同式の過渡計算を行なえばよい。このようにすればある時間経過後の試料内電荷分布は，例えば第8－10図の様になる。このとき試料表面の電位は同図中に示された値となり，これが電荷減衰を計算するための初期値となる。この状態を初期値として電荷注入を停止して電荷減衰の計算を行なったのが第8－11図で，電荷減衰の過程で交叉がみられる。ただし電荷減衰の過程の計算は，その過程で注入電極界面の電界は零と考えられるので，

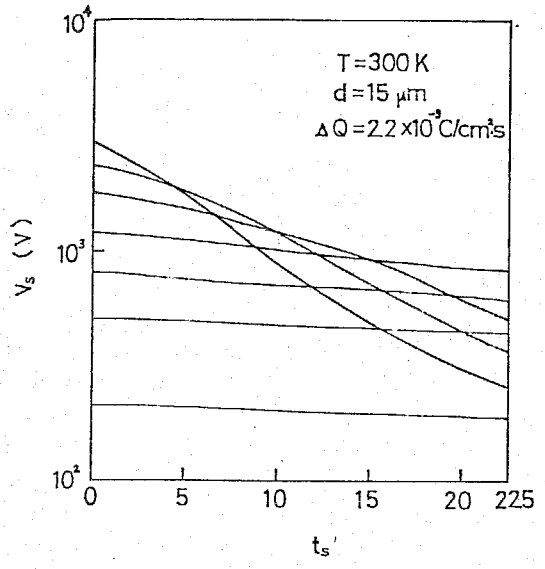
$$V = -e\sum_{i=1}^{m}\left(m-i+\frac{1}{2}\right)(N_i p(\quad) \quad \cdots\cdots (8-35)$$

として求められるVと観測される電位としている。また第8－12図はV＝3,000Vに帯電された場合の試料内での電荷分布の時間変化を示している。

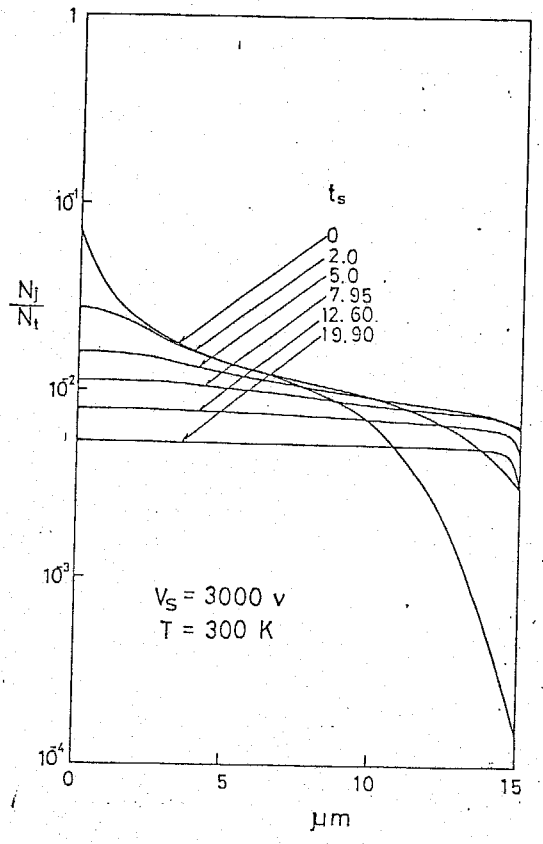
以上のように特殊な注入条件や減衰機構を考えなくても拡散とドリフトを考えるのみで，上記のようにある程度交叉現象についての知見の得られることは興味深く，今後さらに詳細な検討を加えればそのメカニズムが解明できると考えられる。



第8－10図
帯電時の初期分布（T＝300K）
ΔQ＝2.2×10⁻⁹C/cm²·S



第8－11図
電荷減衰の計算例



第8－12図 試料内電荷分布の時間変化

8－6．まとめ

本章では，拡散の効果を考慮して注入電極面電界が零の場合の過渡空間電荷制限電流の数値解析を行なった。その結果，拡散の効果は初期電流の立ち下がり特性となって現われること，電流ピーク発生時間は拡散のあるなしにかかわらずほぼ同じであることが明らかとなった。さらに本数値計算法を用いて拡散を無視した場合の基本式を導き，この式を解くことで従来の拡散を無視したときの解析解とほぼ同じ結果が得られ，しかも従来は時間領域で二分して別々に計算されていたのに対し，本数値計算では一貫して計算されるため特性曲線に折れ曲りも生じないことも明らかとなった。

また，電荷減衰機構についても触れ，拡散とドリフトを考慮するのみである程度交叉現象についての知見の得られることも示した。さらに，トラップのある場合も同計算法で扱かえることは明らかであろう。

第 9 章　空間電荷分極による誘電分散の研究

9-1 まえがき[64)~74)]

本章では大きく分けて二つの問題を扱かう。その一つは試料に小信号を加えた場合のイオン空間電荷分極による誘電分散現象であり，他の一つは大信号を加えた場合の誘電特性に関するものである。まず小信号の場合を前段で扱かう。

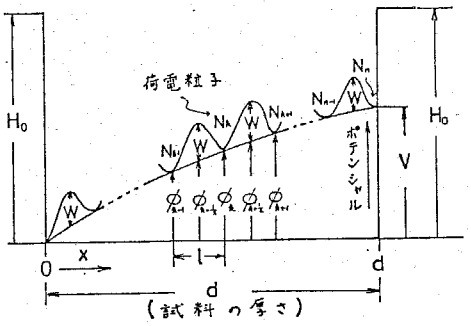
イオン空間電荷分極による誘電分散には，双極子分極による分散と異なり，低周波領域で誘電率が異常に大きくなる現象やバイアス電圧によって分散曲線が変化するなどのいろいろな特徴がみられている[64),65),66)]。しかしこの分極は空間電荷電界の中をイオンが巨視的に移動することによるため，双極子のように簡単に取扱うことができない[67)~69)]。最近この問題をイオンの拡散とドリフトを考えて解析し，誘電率の周波数特性を説明することに成功しているが，イオン濃度の小さい場合を対象にして空間電荷電界を無視して理論が進められている[66)]。しかし，この電界も考慮して理論解析することは非常に困難と考えられる。そこで，静電界で行なってきたホッピング数値解析法を用いて空間電荷電界も含めた交流電界の解析を試みる。すなわち，ホッピング数値解析法によって空間電荷分極の誘電率を解析するための基本的な関係式を導き，これを用いて数値計算する方法を与え，周波数やイオン濃度あるいはバイアス電圧などを変えた場合の計算結果を示してこれを従来報告されている分散や吸収の特性と対比する。さらに試料内の位置におけるイオン濃度変化の位相関係なども検討する。続く後段では，大信号の場合を扱かう。

大信号を印加した場合の特性は，イオンが試料中を大きく変位して動くために非線型性も強くなり，前段における小信号解析を適用することはできない。このような試料中を荷電粒子が大きく移動するときの研究としては，シリコン油やトリクロルベンゼンなど液体を中心とした交流定常特性などがある[70),71)]。それによると，交流電流の定常波形は特徴のある歪み波形となり，また印加交流信号の電圧振幅を変えてゆく場合，誘電損失（tanδ）は振幅により最大値を

生ずる現象（ガルトン効果）などの特性を示すとされている。[71]~[73] これらの諸特性を解析するために，Stern氏らはイオンによる拡散を無視して数値解析を試みている。[74] その結果，信号電圧の振幅を変えてゆくときに最大値を生ずるなどの特性を算出している。しかしながら，交流応答波形や試料内の各位置の電荷の挙動などについてはあまり検討されていない。そこで後段では，このような観点から拡散を無視することなく大信号を印加した場合のイオン空間電荷分極の特性についてホッピング法を用いて解析を試みる。そして，上記の諸特性が説明できることや試料内の荷電粒子の動きについて述べる。また，前段における小信号解析との関連についても明らかにする。

9．2 小信号に対する扱い－誘電分散を示す式

この節では，一次元についてのイオン空間電荷分極の誘電分散の解析を行なう。それに先立ち，再度第9－1図に試料内の荷電粒子の位置及び電位を示すモデルを図示し，以下にホッピング数値解析法の基本式を記す。ただし，ここでは電荷の位置を表わすのに k を用いている。



第9－1図 試料内の荷電粒子の位置及び電位

電極より k 番目の井戸におけるイオン数の時間変化 dN_k/dt は，

$$\frac{dN_k}{dt} = \omega_{k-1,k} N_{k-1} - (\omega_{k,k-1} + \omega_{k,k+1}) N_k + \omega_{k+1,k} N_{k+1}$$

$$(k = 1, 2, \cdots, n)$$

$$\omega_{k,k+1} = \nu \exp\left(-\frac{W}{kT}\right) \exp\left(-\frac{q}{kT}(\phi_{k+\frac{1}{2}} - \phi_k)\right)$$

$$\omega_{k,k-1} = \nu \exp\left(-\frac{W}{kT}\right) \exp\left(-\frac{q}{kT}(\phi_{k-\frac{1}{2}} - \phi_k)\right)$$

$\cdots\cdots$ (9－1)

また，ポテンシャルϕ_kはポアソンの式を満足するとして，

$$\phi_k = \frac{q l^2 N_t}{d\varepsilon}\left\{(n-k)\sum_{i=1}^{k}(i-1)\frac{N_i}{N_t} + (k-1)\sum_{i=k+1}^{n}(n-i)\frac{N_i}{N_t}\right\} + \frac{k-1}{n-1}V \quad \cdots\cdots(9-2)$$

となる。以上の基本式を用いて解析が行なわれるが，本章では次の条件が仮定されている。

(i) 試料内には単一の過剰な可動イオンが存在する。

(ii) 電極面は可動イオンに対してブロッキングである。すなわち，$\omega_{0,1}$，$\omega_{1,0}$，$\omega_{n,n+1}$，$\omega_{n+1,n}$をすべて零とする。

(iii) 可動イオンの遷移は隣接する井戸へのみとする。

(iv) 試料内でのイオンの発生と消滅はない。

(v) 印加電圧Vは直流バイアス電圧V_0に正弦波の交流電圧$\hat{V}e^{j\omega t}$を重畳したものとする。

$$V = V_0 + \hat{V}e^{j\omega t} = V_0 + \delta V \quad \cdots\cdots(9-3)$$

ただし，$V_0 = 0$でもよい。

(vi) 各位置のイオン数N_kは上記の交流電圧と同じ周期で変動する。

(vii) 交流電圧が零の場合のイオン数N_k^0を基準としたN_kの変化分は交流電圧と同じく正弦波であるとするが，位相と振幅は各位置で異なる。すなわち，

$$N_k = N_k^0 + \hat{N}_k e^{j(\omega t + \varphi_k)} = N_k^0 + \delta N_k \quad \cdots(9-4)$$

(9-3)，(9-4)式で交流電圧とイオン数の時間変化分をδV，δN_kとしたが，これらはδVの変化分に対して，δN_kの変化がN_k^0のような基準値に対してかなり小さいような値であるとする。

さて，交流電圧δVがない場合には各位置のイオン数やポテンシャルなどは時間変化しないから，この場合の諸量を肩に零を付けてN_k^0と同じように示し，δVを印加した場合の時間的な変化分をδN_kのように示す。例えば，$\phi_k = \phi_k^0 + \delta\phi_k$となる。また，(9-1)式より遷移確率は，$\delta(\phi_{k\pm\frac{1}{2}} - \phi_k)$

が小さいとして指数項について一次近似きして展開すれば,

$$\omega_{k,k+1} = \omega^{\circ}_{k,k+1}\left\{1 - \frac{g}{kT}\delta(\phi_{k+\frac{1}{2}} - \phi_k)\right\}$$

$$\omega_{k,k-1} = \omega^{\circ}_{k,k-1}\left\{1 - \frac{g}{kT}\delta(\phi_{k-\frac{1}{2}} - \phi_k)\right\}$$

・・・・・(9-5)

となるが, この関係は第7章で述べたように, それが大きい場合にも成立する。

さて, (vii) 項の条件き用いれば, (9-1)式で $dN_k/dt = j\omega\delta N_k$ となるから, (9-5)式も考慮して,

$$j\omega\delta N_k = \omega^{\circ}_{k-1,k}\left\{1 - \frac{g}{kT}\delta(\phi_{k-\frac{1}{2}} - \phi_{k+})\right\}(N^{\circ}_{k-1} + \delta N_{k-1})$$

$$- \omega^{\circ}_{k,k-1}\left\{1 - \frac{g}{kT}\delta(\phi_{k-\frac{1}{2}} - \phi_k)\right\}(N^{\circ}_k + \delta N_k)$$

$$- \omega^{\circ}_{k,k+1}\left\{1 - \frac{g}{kT}\delta(\phi_{k+\frac{1}{2}} - \phi_k)\right\}(N^{\circ}_k + \delta N_k)$$

$$+ \omega^{\circ}_{k+1,k}\left\{1 - \frac{g}{kT}\delta(\phi_{k+\frac{1}{2}} - \phi_{k+1})\right\}(N^{\circ}_{k+1} + \delta N_{k+1})$$

・・・・・(9-6)

交流電圧が零のときには, 各部の電流は零であって基準値の間には次の関係がある。

$$\omega^{\circ}_{k,k+1} N^{\circ}_k = \omega^{\circ}_{k+1,k} N^{\circ}_{k+1}$$

$$(k = 1, 2, \cdots n-1) \qquad \cdots\cdots(9-7)$$

また, 変化分は基準値に対してはかなり小さいとしたことから, 変化分き次のように零とみる。

$$\delta(\phi_{k+\frac{1}{2}} - \phi_k)\cdot\delta N_k = 0$$

$$\delta(\phi_{k+\frac{1}{2}} - \phi_{k+1})\cdot\delta N_{k+1} = 0 \qquad \cdots\cdots(9-8)$$

(9-7), (9-8)式の関係き用いて(9-6)式き整理すれば,

$$j\omega\delta\rho_k = \omega^{\circ}_{k-1,k}\,\delta\rho_{k-1} - (\omega^{\circ}_{k,k-1} + \omega^{\circ}_{k,k+1})\,\delta\rho_k$$

$$+ \omega^{\circ}_{k+1,k}\,\delta\rho_{k+1} + A_{k-1}\sum_{i=1}^{k-1}(i-1)\,\delta\rho_i$$

$$- A_{k-1}\sum_{i=k}^{n}(n-i)\,\delta\rho_i - B_{k-1}\,\delta V$$

$$- A_k\sum_{i=1}^{k}(i-1)\,\delta\rho_i + A_k\sum_{i=k+1}^{n}(n-i)\,\delta\rho_i + B_k\,\delta V$$

$$(k=1,\ 2,\ \cdots,\ n) \qquad \cdots\cdots(9-9)$$

ただし，上式の ρ_k，A_k，B_k は次の量である。

$$\left.\begin{aligned} \rho_k &= g N_k / N_t \ , \quad \rho_k^{\circ} = g N_k^{\circ} / N_t \\ A_k &= \frac{g l^2 N_t}{d\varepsilon kT}\,\omega^{\circ}_{k,k+1}\,\rho_k^{\circ} \\ B_k &= \frac{l}{d\,kT}\,\omega^{\circ}_{k,k+1}\,\rho_k^{\circ} \end{aligned}\right\}$$

$$\cdots\cdots(9-10)$$

さて，(9-9)式の n 元の連立方程式を解いて，$\delta\rho_k/\delta V$ ($k=1, 2, \cdots, n$) なる n 個の解を得るならば，複素誘電率 ε^* で示される誘電分散を求めることができる。すなわち，イオンの移動のみによって発生した分極電荷 δP は，基準値 N_k° と N_k の差つまり δN_k によって次のように示される。

$$\delta P = \sum_{k=1}^{n} g(k-1)\,l\,(N_k - N_k^{\circ})/d$$

$$= \sum_{k=1}^{n} N_t\,l\,(k-1)\,\frac{\delta\rho_k}{d} \qquad \cdots\cdots(9-11)$$

$D = \varepsilon^* E$ で示される試料の複素誘電率は，空間電荷分極すなわち δP による

成分と，試料の静電容量 $\varepsilon \delta E = \varepsilon_0 \varepsilon_s \delta E$ による成分及び他の双極子分極などによる成分の和で示されるが，本章では空間電荷分極のみによる誘電率を扱うことにする。従って，この場合 $E = \delta V / d$ となるので，$\varepsilon^* = \varepsilon' - j\varepsilon''$ として（9－11）式より，$\varepsilon^* = d\delta P / \delta V$ を考慮すれば

$$\left.\begin{aligned} \varepsilon' &= N_t d \sum_{k=1}^{n} \frac{k-1}{n-1} Re\left(\frac{\delta \rho_k}{\delta V}\right) \\ \varepsilon'' &= -N_t d \sum_{k=1}^{n} \frac{k-1}{n-1} Im\left(\frac{\delta \rho_k}{\delta V}\right) \end{aligned}\right\} \quad \cdots\cdots (9-12)$$

上式が空間電荷分極の誘電分散を示す式である。ただし，$\delta \rho_k / \delta V$ は，$g \delta N_k / N_t \delta V$ で，（9－3），（9－4）式に示したように複素量である。そして，（9－12）式の $Re(\delta \rho_k / \delta V)$，$Im(\delta \rho_k / \delta V)$ は，それぞれその実部と虚部を表わしている。従って，この解を与える（9－9）式は n 元の複素連立方程式となる。

9－3 一次元におけるクラマス・クローニッヒの関係

（9－9）式の両辺を δV で割ると，n 個の $(\delta \rho_k / \delta V)$ $(k = 1, 2, \cdots, n)$ の因数を含む項と B_{k-1}，B_k の項となる。これを整理して $k = 1, 2, \cdots, n$ の順に書くと，

$$\sum_{i=1}^{k-2} (i-1)(A_{k-1} - A_k)\left(\frac{\delta \rho_i}{\delta V}\right)$$

$$+\left\{ \omega^{\circ}_{k-1,k} + (k-2)(A_{k-1} - A_k) \right\}\left(\frac{\delta \rho_{k-1}}{\delta V}\right)$$

$$-\left\{ j\omega + \omega^{\circ}_{k,k-1} + \omega^{\circ}_{k,k+1} + A_k(k-1) + A_k(n-k) \right\}\left(\frac{\delta \rho_k}{\delta V}\right)$$

$$+\left\{ \omega^{\circ}_{k+1,k} - (A_{k-1} - A_k)(n-k-1) \right\}\left(\frac{\delta \rho_{k+1}}{\delta V}\right)$$

$$+\sum_{i=k+2}^{n}(n-i)(A_k-A_{k-1})\left(\frac{\delta\rho_i}{\delta V}\right)=B_{k-1}-B_k$$

$$(k=1,2,\cdots,n) \quad \cdots\cdots(9-13)$$

この連立方程式をマトリクス表示すれば,

$$\mathbb{A}\cdot\mathbb{X}=\mathbb{B} \quad \cdots\cdots(9-14)$$

ここで,

$$\mathbb{X}^T=\left(\frac{\delta\rho_1}{\delta V},\frac{\delta\rho_2}{\delta V},\cdots,\frac{\delta\rho_n}{\delta V}\right)\cdots(9-15)$$

$$\mathbb{B}^T=(-B_1,\ B_1-B_2,\ B_2-B_3,\cdots,B_{n-2}-B_{n-1},\ B_{n-1})$$

$$\cdots\cdots(9-16)$$

また, $\mathbb{A}$は(9-13)式の$(\delta\rho_i/\delta V)$の係数をその第k行の成分$[\mathbb{A}]_k$とするようなマトリクスであり,

$$[\mathbb{A}_k]=(0,(A_1-A_2),2(A_2-A_3),\cdots$$

$$\cdots,(k-3)(A_{k-3}-A_{k-2}),\omega^0_{k-1,k}+(k-2)(A_{k-1}-A_k),$$

$$-\{j\omega+\omega^0_{k,k-1}+\omega^0_{k,k+1}+(k-1)A_k+(n-k)A_{k-1}\},$$

$$\omega^0_{k+1,k}-(n-k-1)(A_{k-1}-A_k),(n-k-2)(A_k-A_{k-1}),$$

$$\cdots,(A_{n-1}-A_{n-2}),0) \quad \cdots\cdots(9-17)$$

$\mathbb{A}$, $\mathbb{X}$, $\mathbb{B}$は次のような性質を持っていることはすぐわかる。

(i) ベクトル$\mathbb{X}$は複素数の成分から成る。これは$\delta\rho_k$とδVが位相差を持つことによる。

(ii) ベクトル$\mathbb{B}$は実数の成分から成る。これは(9-10)式からわかる。

(iii) マトリクスAはその対角成分だけが複素数で，その他は実数である。これは(9－13)式を見てすぐ知れる。すなわち，$(\delta\rho_k/\delta V)$の係数のみに虚数$j\omega$が含まれているだけである。

(i)～(iii)の性質から，A，X，Bの成分を次のように複素表示きする。

$$\left.\begin{aligned} &\delta\rho_k/\delta V = \chi_k^R + j\chi_k^I \\ &B_{k-1} - B_k = b_k \\ &A_{i,k} = a_{ik} + \delta(i,k)\,j\omega \\ &(\delta(i,k)_{i=k}=1,\ \delta(i,k)_{i\neq k}=0) \end{aligned}\right\} \quad \cdots\cdots (9-18)$$

ただし，χ_k^R，χ_k^I，b_k，a_{ik} はすべて実数である。上式を用いると，(9－14)式は，

$$\begin{bmatrix} a_{11}+j\omega, & a_{12}, & a_{13}, & \cdots, & a_{1n} \\ a_{21}, & a_{22}+j\omega, & a_{23}, & \cdots, & a_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{k1}, & a_{k2}, & \cdots, & a_{kk}+j\omega, & \cdots, a_{kn} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1}, & a_{n2}, & \cdots & \cdots & a_{nn}+j\omega \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \chi_1^R + j\chi_1^I \\ \chi_2^R + j\chi_2^I \\ \cdots \\ \chi_k^R + j\chi_k^I \\ \cdots \\ \chi_n^R + j\chi_n^I \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \cdots \\ b_k \\ \cdots \\ b_n \end{bmatrix} \quad \cdots\cdots (9-19)$$

上式より次の連立方程式が得られる。

$$\begin{aligned} &a_{k1}\chi_1^R + a_{k2}\chi_2^R + \cdots + a_{kn}\chi_n^R - \omega\chi_k^I \\ &\quad + j(\omega\chi_k^R + a_{k1}\chi_1^I + a_{k2}\chi_2^I + \cdots + a_{kn}\chi_n^I) \\ &\quad = b_k \quad (k=1,2,\cdots,n) \end{aligned} \quad \cdots\cdots (9-20)$$

(9－20)式は実数部と虚数部に分離して，次のように2n元の実数の連立方程式となる。

$$\begin{aligned} &a_{k1}\chi_1^R + a_{k2}\chi_2^R + \cdots + a_{kn}\chi_n^R - \omega\chi_k^I = b_k \\ &\omega\chi_k^R + a_{k1}\chi_1^I + a_{k2}\chi_2^I + \cdots + a_{kn}\chi_n^I = 0 \\ &\qquad (k=1,2,\cdots,n) \end{aligned} \quad \cdots\cdots (9-21)$$

この式を χ_k^R と χ_k^I について解くと，

$$\left.\begin{aligned} \chi_k^R &= -\sum_{i=1}^{n} \frac{a_{ki}}{\omega}\chi_i^I \\ \chi_k^I &= \sum_{i=1}^{n} \frac{a_{ki}}{\omega}\chi_i^R - \frac{b_k}{\omega} \end{aligned}\right\}$$

$$(i=1, 2, \cdots, n) \qquad \cdots\cdots (9-22)$$

結局，標記（9－9）式を解くことは，（9－22）式を満足するような一連の χ_k^R，χ_k^I を求めることになる。（9－22）式を見ると実数部の成分 χ_k^R は虚数部の組 χ_k^I（$k=1, 2, \cdots, n$）によって定まり，虚数部の成分 χ_k^I は，逆に実数部の組 χ_k^R（$k=1, 2, \cdots, n$）によって与えられる性質を持っている。これは誘電分散に関するクラマス・クローニッヒの関係としてよく知られている。[75] 尚，（9－22）式は，Gauss の消去法などにより解くことができる。

9.4. 数値計算例と検討[75)-(76)]

以下に示す数値計算では，イオンの電荷量 qN_t，バイアス電圧 V_0 などが，パラメータとして用いられる。試料の厚さは $d=1,000$ Å，ホッピング距離は $l=20$ Å，試料の比誘電率 $\varepsilon_s=4.0$，温度は $T=500$ K としたが，これらの値はMIS試料の Si_2O 絶縁膜について測定されている条件にほぼ合わせたものである。しかし，もっと厚い膜に対しても第7章の換算式を用いて同様な計算ができる。ただし，印加する交流電圧の周波数 f は，$\tilde{f}=f/\nu \exp(-w/kT)$ で変換されている。また，バイアス電圧 V_0 のみの印加によって決まる基準値 $\omega_{k,k+1}^0$，ϕ_k^0，N_k^0 などは第3章の方法によって定められる。N_k^0 による ε' への寄与は除いて考えてゆくが，これは誘電分散には関係しない。

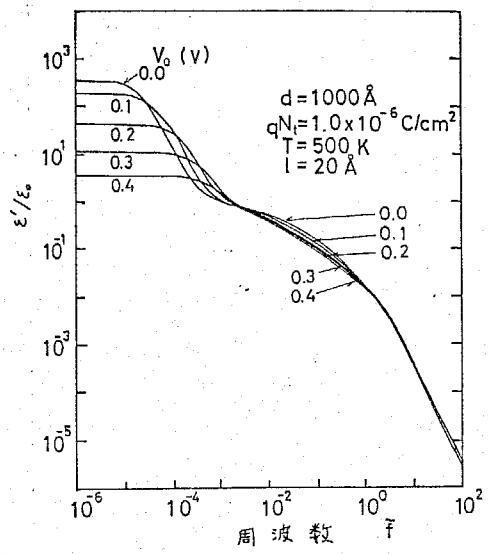
<9－4－1> $\varepsilon'(\tilde{f})$，$\varepsilon''(\tilde{f})$ の計算結果

第9－2図と第9－3図は，$qN_t=1.0\times10^{-6}$ C/cm² としたと

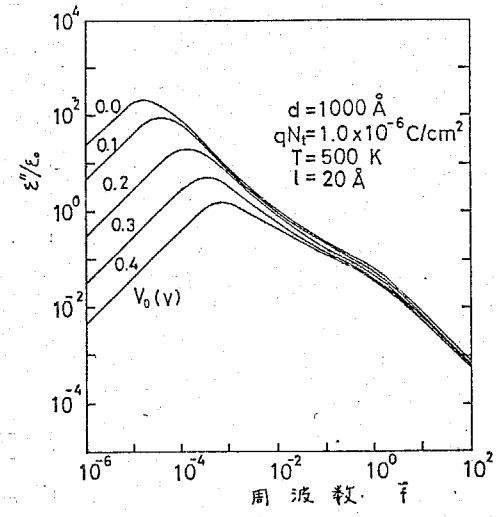
き，V_0を変えてε'とε''の周波数fに対する特性を示したものである。ただし，図では比誘電率を用いて示した（以下，同様）。まず，この特性には双極子分極と非常に異なる点がみられる。すなわち，デバイの双極子分極のモデルによれば，緩和時間は$\tau = 1/2\nu\exp(-W/kT)$で与えられ，ε''の最大となる周波数f_mは，

$$f_m = f_m/\nu\exp(-W/kT) = 1/\pi\tau \quad \cdots\cdots (9-23)$$

しかし，第9－3図に見られるε''の最大となる周波数f_mは，（9－23）式の値より非常に小さい。そして，第9－2図のε'による分散も非常に小さいfで生じている。更にデバイ形では，バイアス電圧によってf_mの変わることもなく分散の生じる周波数も変化しないが，第9－2図，第9－3図の空間電荷分極ではこれらが変わってくる。またε'，ε''の大きさそのものもV_0によって変化しており，これも双極子分極とは異なる。しかし，$f=1$の近くに分散や吸収とみられるわずかなε'，ε''の変化がみられる。これはおそらく双極子形の分散，吸収が現われたものである。すなわち$f=1$では，実際の周波数が$f=\nu\cdot\exp(-w/kT)$であり，$\nu\exp(-W/kT)$がイオンの遷移確率であるから，印加交流電圧の一周期の時間が，ちょうどイオンが一つのポテンシャルの山を越える時間になる。従って，$f=\nu\exp(-W/kT)$の周波数



第9－2図 バイアス電圧を変えた場合の誘電率ε'の計算例

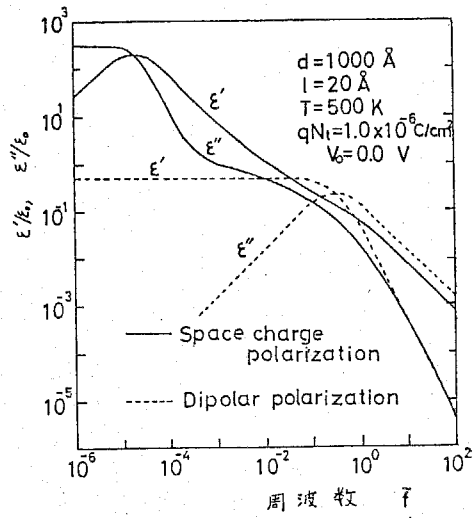


第9－3図 バイアス電圧を変えた場合の誘電率ε''の計算例

では，イオンは一つの山を越える往復しているとみられる。つまり，これはデバイモデルで表わされる双極子分極である。

ホッピング数値解析法においてイオンの移動を一つの山を越える往復運動とし，空間電荷による各部のポテンシャル変化がないとすれば，(9－1)，(9－2)の基本式からいわゆるε′，ε″に関するデバイの式が導かれる。すなわち，

$$\left.\begin{aligned}\varepsilon' &= \frac{\mu^2 n_0}{2kT}\frac{1}{1+\omega^2\tau^2} = \frac{\mu^2 N_t}{2kTd}\cdot\frac{1}{1+\pi^2 f^2}\\ \varepsilon'' &= \frac{\mu^2 n_0}{2kT}\cdot\frac{\omega\tau}{1+\omega^2\tau^2} = \frac{\mu^2 N_t}{2kTd}\frac{\pi f}{1+\pi^2 f^2}\end{aligned}\right\} \quad \cdots\cdots (9-24)$$



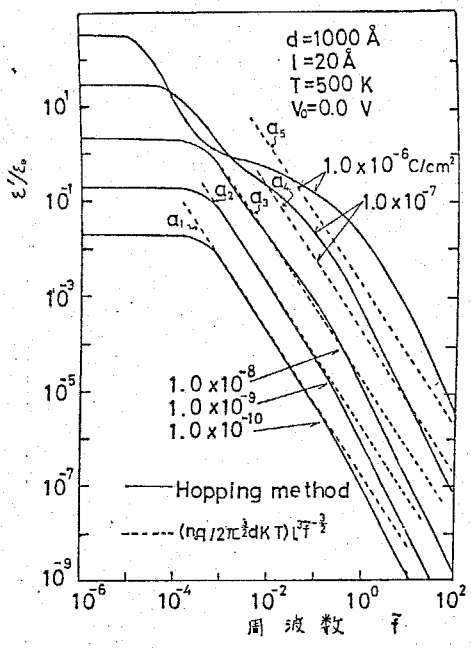
第9－4図　双極子分極と空間電荷分極による誘電率ε′と誘電損率ε″の数値計算の比較

ここで，n_0は単位体積あたりの粒子の濃度で$n_0 = N_t / d$，μは双極子のモーメントで$\mu = ql$である。(9－24)式で計算した結果を第9－2図，第9－3図の結果と比較したのが第9－4図である。これを見ても$f = 1$近辺のε′，ε″の変化はデバイ形の双極子分極によるものとみられるであろう。そして，$f \ll 1$に現われるε′，ε″の分散や吸収は，イオンが幾つものポテンシャルの山を越えて移動する空間電荷分極によるものであることを示していると言えよう。なお，第9－2図，第9－3図に見られるバイアス電圧によって分散，吸収曲線が変化する現象は，Si－SiO_2－Crのmis構造のSiO_2絶縁膜などについて報告されている特性とよく似ている。

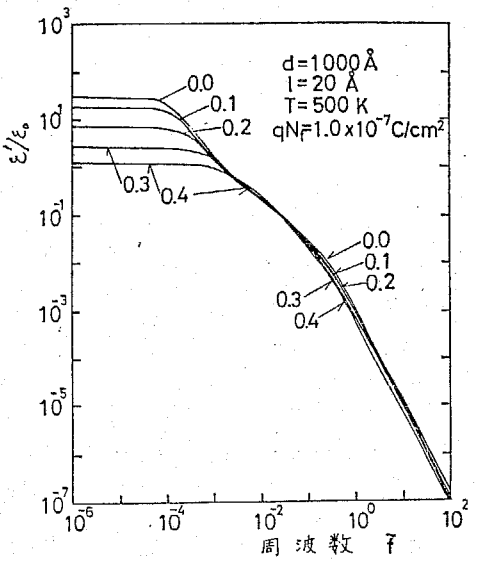
全電荷量を$qN_t = 1.0 \times 10^{-7}$ C/cm²と減少させたときの特性をε′のみについて示したのが第9－5図である。バイアス電圧V_0による変化も第9－2図より小さく，空間電荷効果の減少によるとみられる。

第9－6図，第9－7図は$V_0 = 0$としてqN_tを変えたときのε′，ε″の

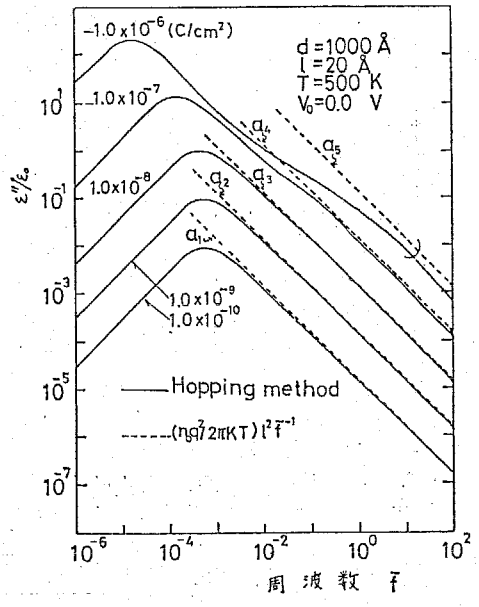
特性を示す。やはり分散，吸収の生じる周波数が qN_t によって変化すること，あるいは，ε'，ε'' の大きさ自体が qN_t に比例しないことなど，双極子分極とは異なっている。なお，両図中の a_1，a_2，・・・で示した直線は他の研究者による計算結果を示しており，後に論じる。さらに第9－8図に温度特性として ε' の計算例を示しておいた。これは，$\nu \exp(-W/KT)$ の変化によるものである。



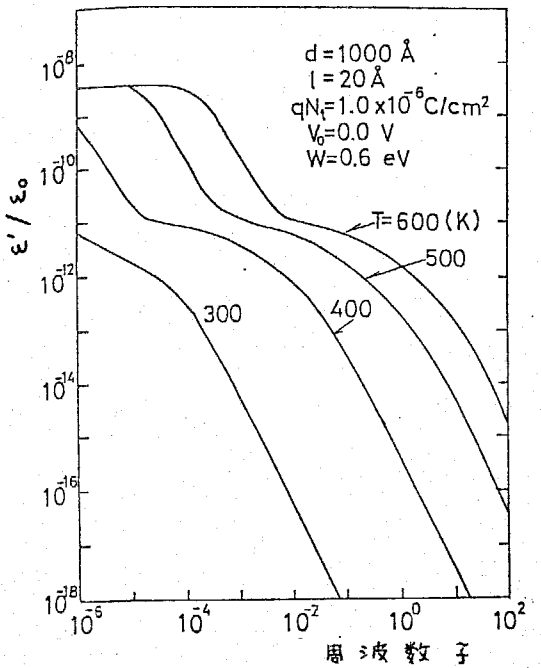
第9－6図　試料内全電荷量による誘電率 ε' の周波数依存性の計算例



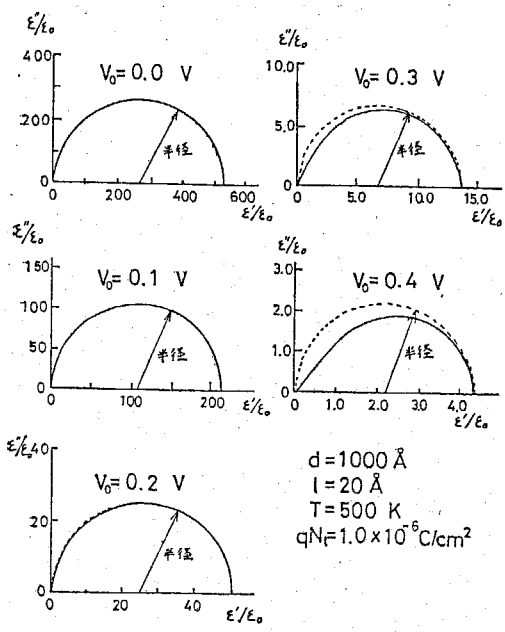
第9－5図　全電荷量の少ない場合の誘電率 ε' の周波数依存性の数値計算例



第9－7図　試料内全電荷量による誘電損率 ε'' の周波数依存性の計算例



第9．8図 誘電率ε′の温度特性の計算例



第9．9図 イオン空間電荷分極による誘電率ε′と誘電損率ε″の関係（Cole-Cole plot）

<9-4-2> ε′～ε″の関係

ε′～ε″の関係はCole-Cole plotとして知られている。前節に得られた結果からε′～ε″の特性を調べた一例が第9-9図である。$V_0=0$の場合はほぼ半円であるが，V_0を増してゆくと形が変化してゆき，いわゆるレムニスケート形になってゆく。従来，緩和時間の分布に帰せられていたこの形のε′－ε″特性が，空間電荷分極で得られたことは興味深く，ここに一例を掲げただけであるが，最近，液晶の測定でレムニスケート形の特性が報告されている。(76)

<9-4-3> 試料内のイオン濃度の変化分とその位相

ε′，ε″の計算では，（9-18）式に示される$\delta\rho_k/\delta V$の実数部と虚数部を求め，これを（9-12）式に用いた。この両部は次のようにイオン濃度の変化分δN_kに関係する。

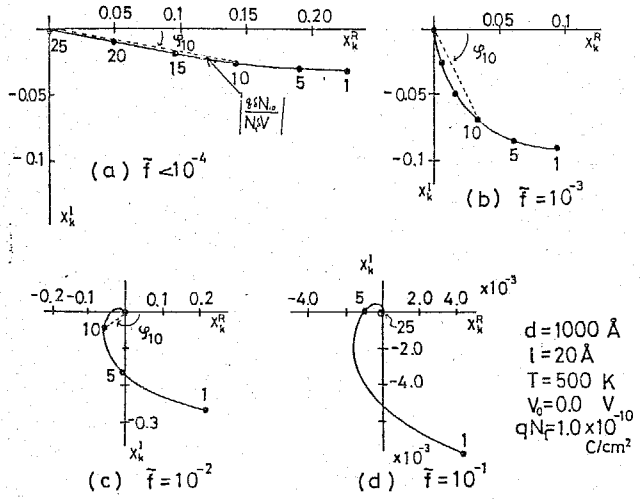
$$\left.\begin{aligned}\chi_k^{\,R} &= Re\left\{q/N_t\cdot(\delta N_k/\delta V)\right\}\\ \chi_k^{\,I} &= Im\left\{q/N_t\cdot(\delta N_k/\delta V)\right\}\end{aligned}\right\}$$

・・・・・(9-25)

従って，交番電圧δVを与えたとき，N_t を定めれば，χ_k^R，χ_k^I の計算値から δN_k の大きさとδVに対する位相差を求めることができる。すなわち，δVの位相を基準にとりこれを実数とみれば，(9-25)式より $q\delta N_k$ の絶対値とその位相差 φ_k は，

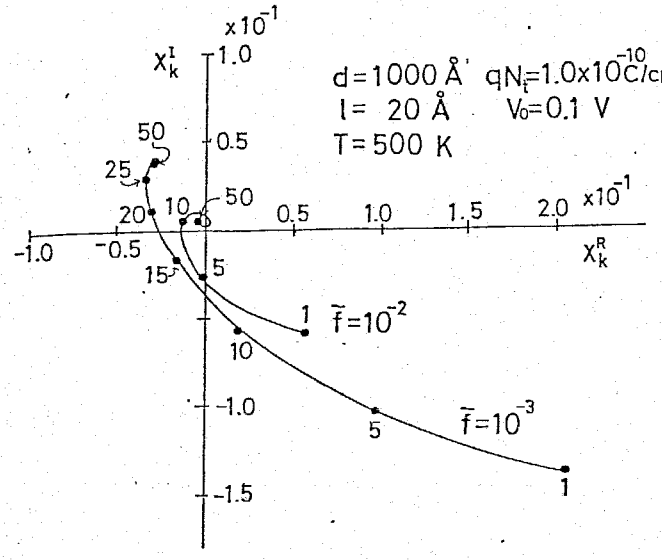
$$\left.\begin{aligned} |q\delta N_k| &= N_t \delta V \sqrt{(\chi_k^R)^2 + (\chi_k^I)^2} \\ \tan\varphi_k &= \chi_k^I / \chi_k^R \end{aligned}\right\} \cdots (9-26)$$

第9-10図は，$V_0 = 0$ の場合，$Re(q\delta N_k / N_t \delta V)$ と $Im(q\delta N_k / N_t \delta V)$ を複素平面に図示したものである。$V_0 = 0$ としたので，試料内の半分つまり $k = 0 \sim 25$ の間の各場所での値である。他の半分は当然原点に対して対称となる。$|q\delta N_{10} / N_t \delta V|$ と φ_{10} は図に $k = 10$ として示した値となる。(a)図は第9-7図を参照して，$f < 10^{-4}$ のε″の最大となる f より以下のときで，各位置のイオンは交流電圧に対し位相遅れがほぼ同じで，振幅は試料の中心からの距離にほぼ比例している。(b)図はより周波数の高い $f = 10^{-3}$ の場合で，前の場合に比べて振幅は減少するが，位相は各部で差が生じ90°の遅れに近づいてくる。第9-7図を参照して，これはちょうどε″の最大となる f である。つまり誘電損が増大してきたことを示す。(c)図は更に周波数が高くなった場合で $f = 10^{-2}$ である。位相は $\varphi_k = 90 \sim 180°$，$\varphi_k > 180°$ の部分も生じ，δVの方



第9-10図　試料内の各位置におけるイオン濃度変化の振幅と位相（$V_0 = 0$）

向と逆位相の部分が中心から少し離れたところにでてくる。(d)図は $\tilde{f}=10^{-1}$ と更に高い周波数のときであるが，中心付近の位相は複雑で，曲線はうず巻状になっている。第9－10図に示したこれらの結果はイオン濃度の比較的小さい場合であるが，これが大きいときは更に複雑な変化をする。また，$V_0 \neq 0$ のときの特性は，第9－11図に示すように中心に対して対称とならない。



第9－11図　試料内の各位置におけるイオン濃度変化の振幅と位相（$V_0 \neq 0$）

<9－4－4>　空間電荷電界を考慮しない従来の計算との比較

空間電荷電界を考慮せずに，拡散とドリフトによって空間電荷分極の誘電分散を解析し，次のような ε'，ε'' の周波数特性が得られたことが最近報告され，この結果，PVDFの特性が説明されるものとして注目された。すなわち，試料の拡散定数をDとして，

$$\left.\begin{aligned} \varepsilon' &= (n_0 q^2 / 2\pi^{\frac{3}{2}} d\,kT)(D/f)^{\frac{3}{2}} \\ \varepsilon'' &= (n_0 q^2 / 2\pi\, kT)(D/f) \end{aligned}\right\} \cdots (9-27)$$

ただし，上式は

$$d\sqrt{2\pi f/D} \gg 1 \qquad \cdots\cdots (9-28)$$

なる条件の成立範囲で導かれたものである。なお，n_0 は可動イオンの濃度である。拡散定数Dは，ホッピング数値解析法では，$D=\nu l^2 \exp(-W/kT)$ であるので，これを(9－27)，(9－28)式に代入すれば，

$$\varepsilon' = (n_0 q^2 / 2\pi^{\frac{3}{2}} d\,kT)\, l^2 f^{-\frac{3}{2}}$$

$$\varepsilon'' = (n_0 q^2 / 2\pi kT)\, l^2 f^{-1} \quad \cdots\cdots (9-29)$$

$$d\sqrt{2\pi f / l} \gg 1 \quad \cdots\cdots (9-30)$$

従って，(9-29)式の理論計算の結果をホッピング数値解析法の結果と比較できる。すなわち，第9-6図，第9-7図にa_1，a_2，・・・と示した直線が，(9-29)式をプロットしたもので，$d = 1,000$Å，$l = 20$Åとし，n_0はそれぞれ示された値にしてある。また，(9-30)式の条件は$f \gg 6.7 \times 10^{-5}$となる。

この比較でわかるように，本数値計算の結果は理論式(9-29)式と$\ln \varepsilon' \sim \ln f$，$\ln \varepsilon'' \sim \ln f$の傾斜がほとんど一致し，$\varepsilon'$と$\varepsilon''$の大きさも(9-29)式より本数値計算の方が若干小さいだけである。そして，gN_tが小さいほど両者の一致がよくなるのが，図示した結果からうかがえる。このことはgN_tが小さいほど空間電荷電界の効果が少なくなり，これを無視した(9-29)式の近似がよくなるからと考えられる。なお，ε'とε''のこの周波数特性の理論式は周波数の高い範囲のみを説明できるもので，分散，吸収の現象の周波数範囲には適用できない。

9-5　大信号に対する扱い－誘電特性の解法[77),(78)]

この節では大信号に対する扱かいを示す。「まえがき」でも述べたように，この場合は，粒子が試料内を大きく変位して動くと考えられ，そのため，非線形性も強い。従って，2節の(vi)，(vii)を仮定することはできない。そこで(9-1)式をそのままの形で扱かう必要がある。まず，$V_m \sin \omega t$なる交流電圧を印加した場合の解析法を述べる。

<9-5-1>　(9-1)式の周期解の解法[77),(78)]

(9-1)式は，n個のポテンシャル井戸に存在する粒子の運動を記述する式であるが，次のように各井戸の粒子数N_kを要素とするn元のベクトルを用いて書き換えることができる。

$$\dot{x} = \Phi(x, t) \cdot x$$

ただし，

$$\mathfrak{x}^T = (N_1, N_2, \cdots, N_m)$$

$$\mathfrak{f}(\mathfrak{x}, t) = \begin{bmatrix} -\omega_{1,2}, \omega_{2,1} & & & \\ \omega_{1,2}, -(\omega_{2,1}+\omega_{2,3}), \omega_{3,2} & & & \\ 0, \omega_{2,3}, -(\omega_{3,2}+\omega_{3,4}), \omega_{4,3} & & & \\ & \ddots & & \\ & & \omega_{n-1,n}, -\omega_{n,n-1} & \end{bmatrix} \quad \cdots\cdots (9-31)$$

従って，(9-31)式よりその基本解は，

$$\mathfrak{x}(t) = \mathfrak{T}(\mathfrak{x}(t_0), t) \cdot \mathfrak{x}(t_0) \quad \cdots\cdots (9-32)$$

となることがわかる。ただし，$\mathfrak{x}(t_0)$は$t=t_0$における初期分布で，$\mathfrak{T}(\mathfrak{x}_0, t)$は$t=t_0$で$\mathfrak{T}(\mathfrak{x}_0, t_0)$＝正（単位行列）となる行列である。ところで，(9-32)式は一般的な(9-31)式の解であるが，ここでは周期Tの交流電圧を印加した場合の同じ周期Tで振動する解を求めているのであるから，

$$\mathfrak{x}(t) = \mathfrak{x}(t+T) \quad \cdots\cdots (9-33)$$

なる関係を満足するものが(9-31)式の解となる。このことは，$t=t_0$すなわち初期における分布$\mathfrak{x}(t_0)$と$t=t_0+T$における分布$\mathfrak{x}(t_0+T)$とが等しくなることを意味している。よって，(9-31)式の周期解を求めることは，結局(9-33)式を満足するような初期値を定め，一周期間にわたり，(9-31)式の積分値を求めることである。その場合に初期値は以下に示す手順によって求めることができる。

(i) $\mathfrak{x}(t_0)$を仮定する。（この定め方は任意でよいが，$V=0$における定常分布を初期値とした。）

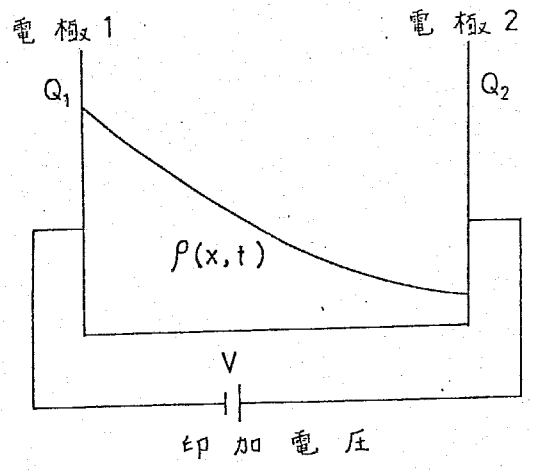
(ii) 周期Tの区間にわたり，(9-31)式の積分をする。すなわち，(9-31)式の微分方程式を解く。

(iii) (ii)によって求められた時間T後の解$x(t_0+T)$が最初に与えた$x(t_0)$との間で，ε_{PS}を収束条件として，$|x(t_0+T)/x(t_0)-1| < \varepsilon_{PS}$を満足するときには，$x(t_0)$を解として採用するが，そうでないときには$x(t_0+T)$を初期値として(ii)に戻り，再び計算をくり返す。ただし，この章での計算では，$\varepsilon_{PS}=1.0\times10^{-3}$とした。

以上によって交流定常状態におけるある時間t_0における初期値が定められるが，収束計算の最後の一周期間の値は，その場合の定常周期解を示すことになる。尚，このような非線型微分方程式の周期解の初期値の求め方については，上記以外にも種々の方法が報告されている。[77],[78]

<9-5-2> 外部回路を流れる電流の式[79]

第9-12図に示すように，試料内部に$\rho(x,t)$なる分布の電荷があり，電圧Vを印加した場合の電極1，2に誘起される電荷Q_1，Q_2は，試料のイオン空間電荷分極以外の容量をCとすれば，この容量の充電々荷と$\rho(x,t)$なるイオン空間電荷による誘起電荷との和で示され，付録4を参照して次のようである。



第9-12図 外部回路に流れる電流を求めるための説明図

$$\left.\begin{aligned} Q_1 &= -CV - \int_0^d \frac{d-x}{d}\rho(x,t)\,dx \\ Q_2 &= CV - \int_0^d \frac{x}{d}\rho(x,t)\,dx \end{aligned}\right\} \quad \cdots\cdots (9-34)$$

従って，印加電圧として$V_m \sin\omega t$なる交流電圧を加えた場合に外部回路に流れる電流は，Q_1及びQ_2の時間変化によって表わされ，

$$J(t) = \frac{dQ_2}{dt}\left(= -\frac{dQ_1}{dt}\right)$$

$$= \frac{d}{dt}(CV) - \sum_{j=1}^{n} \frac{(j-1)\ell}{d} \frac{d}{dt} q N_j \quad \cdots\cdots (9-35)$$

この(9-35)式で示される電流成分のうち，第1項はコンデンサ容量による充放電々流であり，第2項がイオン空間電荷分極による電流成分である。第9-1図で示される回路系では両者が観測されるが，シェーリングブリッジを用いれば，後者の成分だけを取り出して測定することができる。そして，この後者の電流成分による特性が，空間電荷分極による大信号交流応答特性の定常波形として研究されている。そこで，ここでも電流としてはこの成分を用いる。[70]

<9-5-3> 誘電損失（tanδ）[71]

誘電損失（tanδ）は，

$$\tan\delta = \frac{\text{一周期の損失エネルギー}}{\text{一周期の充電エネルギー}} \quad \cdots\cdots (9-36)$$

で定義される量である。この関係は素子が非線形である場合にも拡張すれば成立つと考えられる。すなわち，$V = V_m \sin\omega t$なる電圧を印加した場合，(9-35)式で示される電流が流れるときのtanδもこの式によって定められ，

$$\tan\delta = \frac{f\int_0^T V(t)\cdot I(t)\,dt}{\omega C V_m^2/2} \quad \cdots\cdots (9-37)$$

となる。ここで，$C = \varepsilon_0 \varepsilon_s / d$，$\omega = 2\pi f$である。

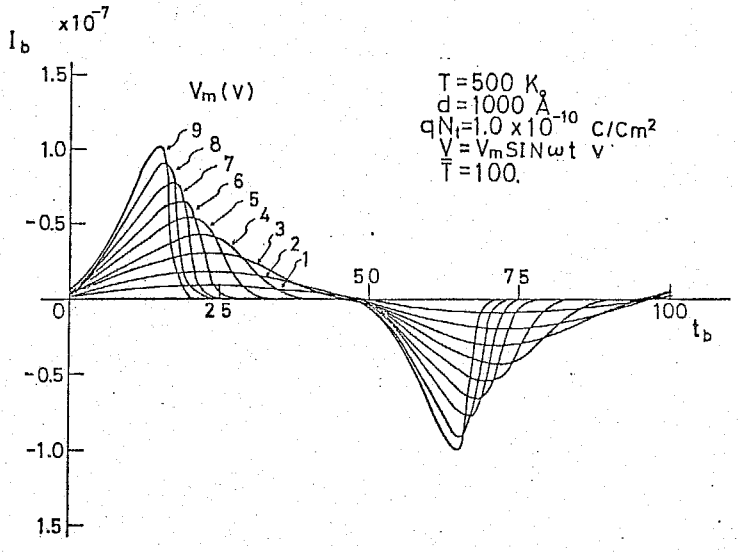
ただし，(9-37)式で定められるδの値は，素子が線型である場合には印加電圧と流れる電流の間の位相差を表わすもので明確な意味があるが，本論文で扱かう非線形的な電荷の振舞いに対してはこのような意味はなく，素子の平均的な損失の割合を表わしているにすぎない。

9.6 大信号交流応答の数値解析例

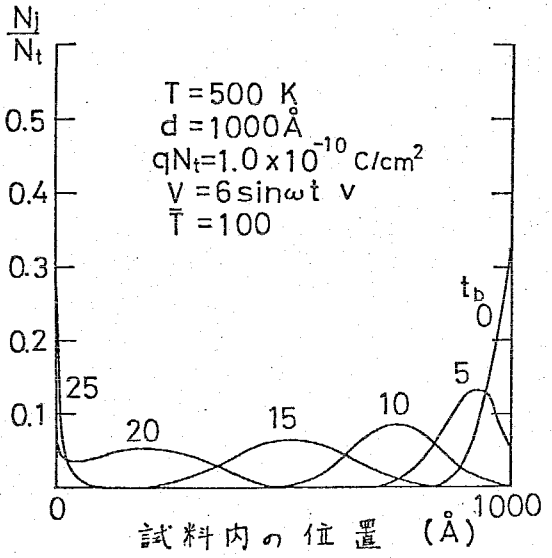
<9.6.1> 交流定常波形の計算例

前節で述べた数値解析法に従い，交流電圧を印加した場合について，イオン空間電荷分極により観測される電流波形の数値計算をすることができる。ただし，時間及び電流はt_b，I_bで規格化されている。

第9-13図は，試料の厚さdを1，000Å，温度Tを500K，誘電率ε_sを3.9，試料に含まれるイオン総量qN_tを1.0×10^{-10}C/cm²，lを20Åとして，周期$\bar{T}$=100.（$\nu\exp(-kT/W)$で規格化）の交流電圧$V=V_m\sin\omega t$（$=V_m\sin 2\pi t_b/\bar{T}$）を印加した場合について，振幅$V_m$を変化させて数値計算を行なった例である。同図より，印加する電圧の振幅が大きくなるに従って波形が歪んでいくことがわかる。このような電流波形の得られる原因は，試料内の電荷の動きと対応させればこれを調べることができる。第9-14図は第9-13図中の振幅V_m=6Vの場合についての試料内のイオンキャリアの動きを示している。第9-13図と第

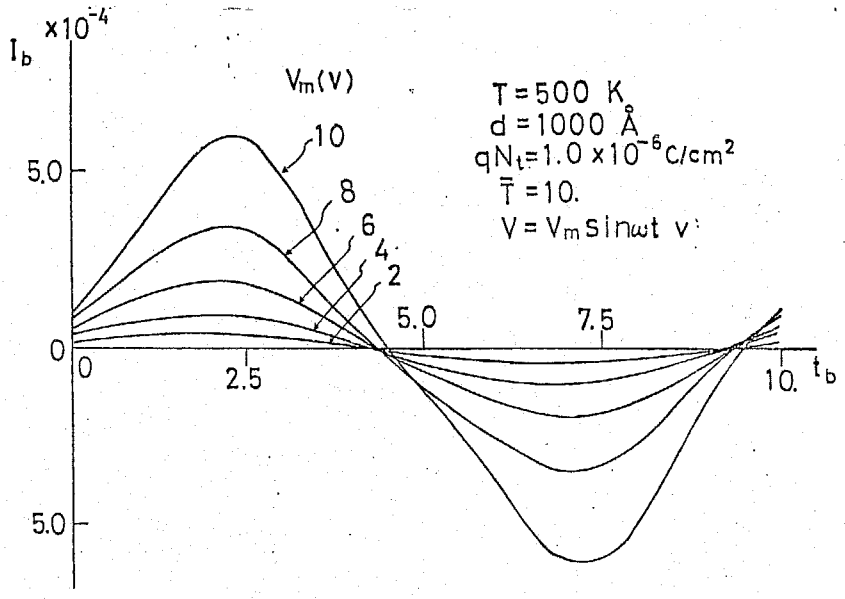


第9-13図　印加電圧の振幅を変えた場合のI_b～t_b特性



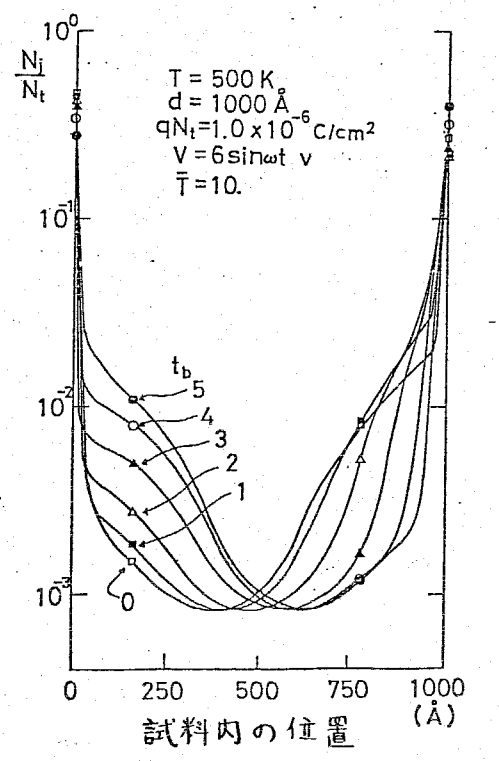
第9-14　試料内の荷電粒子の挙動

9－14図を比較すれば，電流波形の歪みはキャリア全体が印加電圧の半周期よりも速く一方の電極に移動し，電導に寄与するキャリアがなくなることから生ずると考えられる。そして，この場合のように電流が歪んだ波形となる場合，$t_b = 0$より電流が最大となるまでの時間が，ほぼキャリアの先端が試料間を移動する時間と一致していることがわかる。



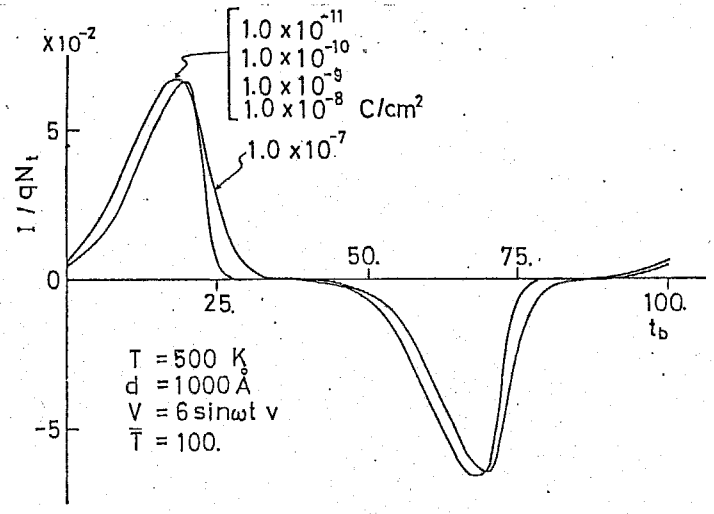
第9－15図　印加電圧を加えた場合の$I_b - t_b$特性

第9－15図は第9－13図の場合と同様の条件で，試料内の総電荷量qN_tを1.0×10^{-6}C/cm²として，印加電圧の周期$\bar{T}$を10.0として電流波形につき数値解析を行なった例を示している。この場合，電流波形はほぼ正弦波の形状をしていることがわかる。第9－16図は，この場合の試料内の電荷の動きさ，振幅$V_m = 6$Vの場合について示したものであるが，空間電荷電界の影響が大きくなり，電荷は第9－14図に示されたような試料内を大きく移動する動きをしていない。このように交流定常電流波形は試

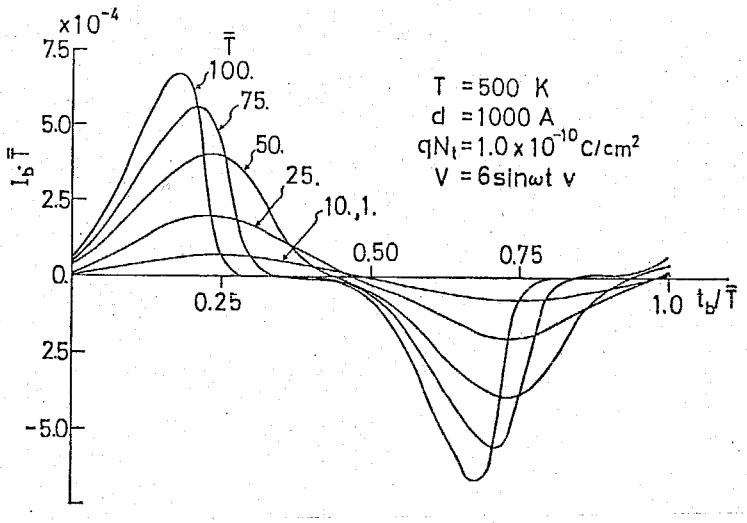


第9－15図　試料内の荷電粒子の挙動

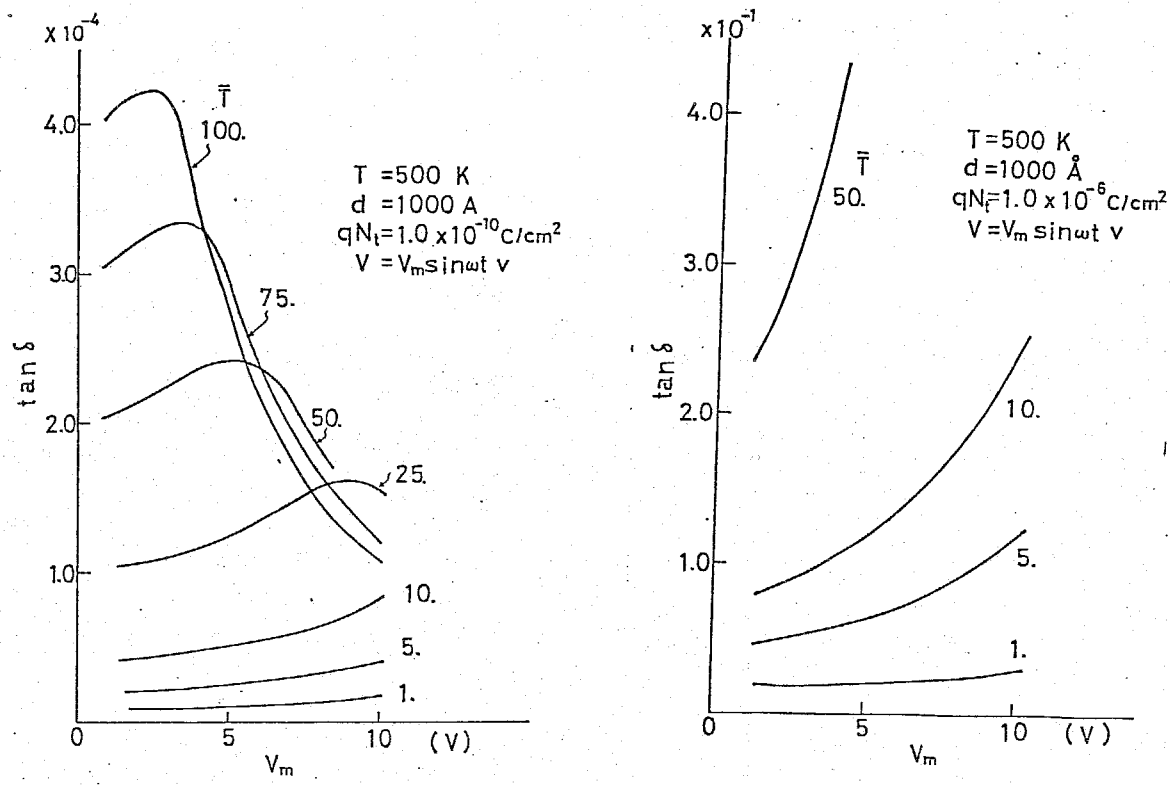
料内の電荷の動きと密接に関係していると考えられるが，このことは試料内に含まれる電荷量や印加電圧の周期に依存するものとみられる。この点をさらに明らかにするために第9－17図では，試料内に含まれる全電荷量を変えた場合について，印加電圧の振幅 $V_m = 6$ V，周期 $\bar{T} = 100.$ として数値計算した結果を示している。同図より，空間電荷による効果は $qN_t = 1.0 \times 10^{-8}$ C/cm² 以上の領域において顕著にあらわれることがわかる。また，第9－18図は $qN_t = 1.0 \times 10^{-10}$ C/cm²，印加電圧の振幅 V_m を6 Vとして，周期 $\bar{T}$ を変化させた場合の電流波形を示している。同図より，周期 $\bar{T}$ が長くなるほど波形の歪みは大きくなるが，このことは短い周期の場合には電荷は試料内を十分移動しないが，長い周期の場合には電荷は電極間にわたって移動し，半周期の間にほぼ完全に一方の電極に寄ってしまうために起こるものと考えることができる。



第9－17図　試料内の総電荷量を変えた場合の $I_b \sim t_b$ 特性



第9－18図　印加電圧の周期を変えた場合の $I_b \sim t_b$ 特性



(a) $qN_t = 1.0 \times 10^{-10}$ C/cm² (b) $qN_t = 1.0 \times 10^{-6}$ C/cm²

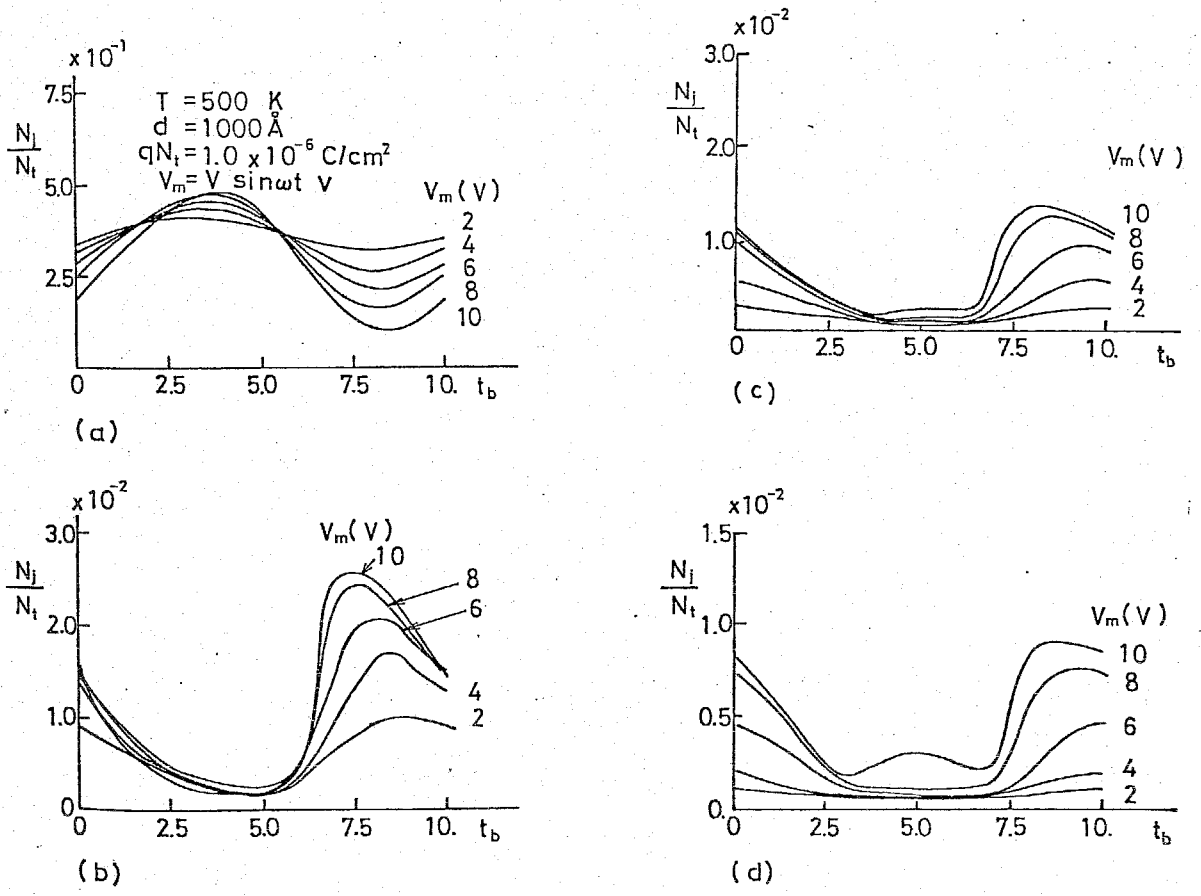
第9－19図　印加電圧の振幅を変えた場合のtanδの計算例

以上までの数値計算から試料内に含まれる電荷の挙動と電流の関係が明らかとなったが，このような場合の誘電損失（tanδ）は，（9－37）式を用いて計算することができる。第9－19図（a），（b）は，試料内に含まれる全電荷量qN_tをそれぞれ1.0×10^{-10} C/cm²，1.0×10^{-6} C/cm² として，試料に印加する電圧の振幅V_mを変化させた場合のtanδを（9－37）式より求めたものである。同図（a），（b）から振幅によりtanδの特性は変化するが，特に（a）の場合においては，振幅によりtanδが最大値をとるいわゆるガルトン効果が現われている。このようなガルトン効果の現われる原因については，印加電圧により試料内のキャリア濃度が減少するためなどの説明もあるが，このような特殊な現象を考えなくても空間電荷電界と拡散を考慮して現象が説明できることは興味深い。

式が成立すると考えられるが，これを確認してみる。

第9-20図，(a)，(b)，(c)，(d)は，それぞれ電極1より1番目，6番目，11番目，16番目のポテンシャル井戸における電荷の時間的な変化の様子を調べたものである。計算は第9-13図と同様に，$qN_t = 1.0 \times 10^{-10}$ C/cm²，$\bar{T} = 100.0$，$d = 1,000$ Å，$\ell = 20$ Å，$T = 500$ Kとした。同図より，印加電圧の振幅が小さくなるに従い，電荷の変化は正弦波に近い変動をしていることがわかる。尚，図中の点線は印加電圧が零の場合のその位置におけるイオン数を示している。

第9-21図，(a)，(b)，(c)，(d)は同様にして，$qN_t = 1.0 \times 10^{-6}$ C/cm² の場合について，電極1より1番目，6番目，11番目，

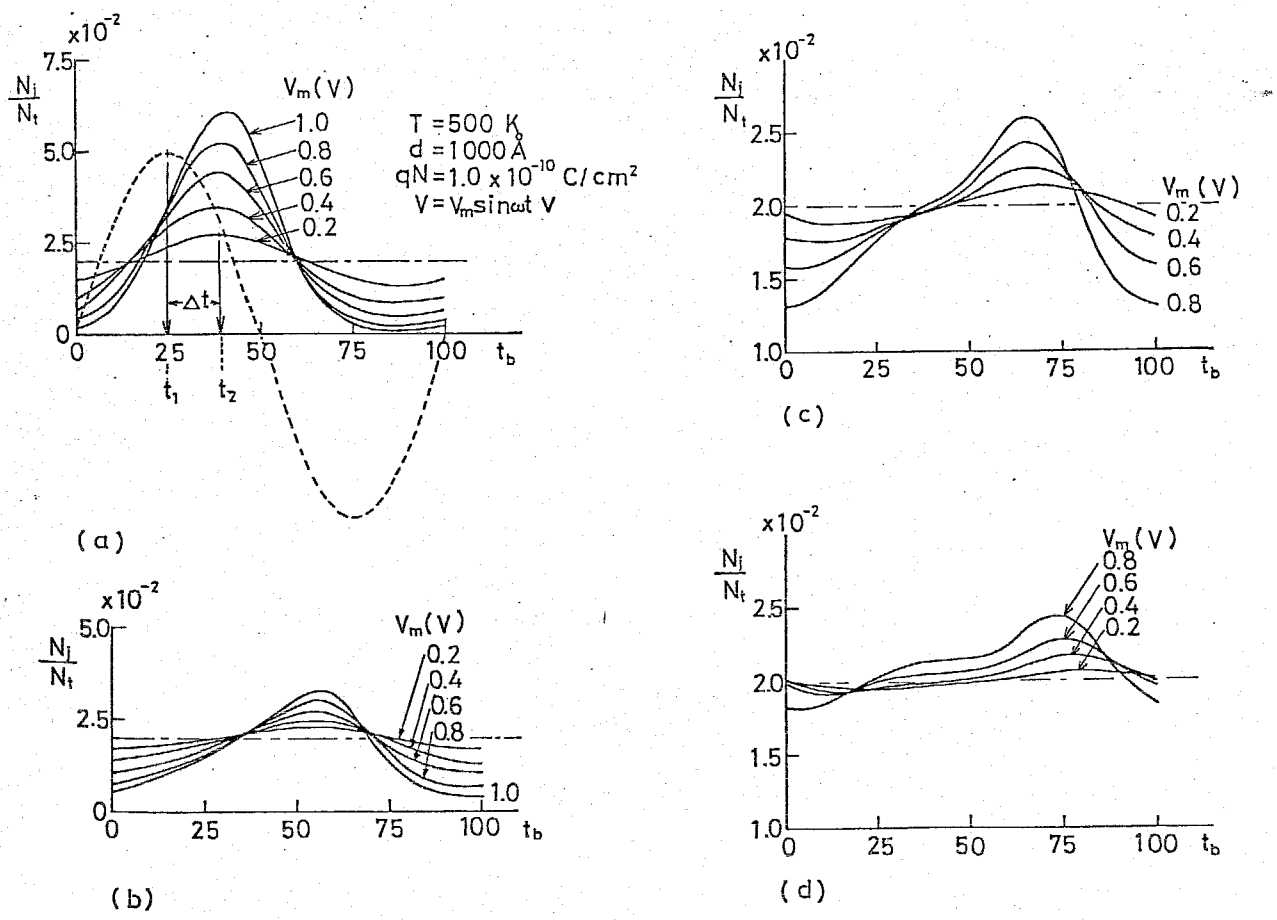


第9-21図　印加電圧の振幅を変えた場合の各ポテンシャル井戸における荷電粒子の挙動（$qN_t = 1.0 \times 10^{-6}$ C/cm²）

以上までの数値解析から，試料中に含まれるイオン空間電荷により，交流電圧を印加した場合に観測される電流が歪んだ波形となる場合があること，誘電損失については振幅によりその大きさが変化することなどが明らかとなった。

9．7　大信号交流応答に対する検討

試料に振幅の大きな交流電圧を印加した場合には，第9－14図で示されるように電荷は試料中を大きく移動する。一方，小信号解析を行なった際は，印加する正弦波電圧が小さいので，（9－4）式を仮定して解析を行なった。しかし，9．5節の数値解析法によれば，振幅の大小にかかわらず試料内の各位置の電荷の時間的な変化を調べることができる。振幅の小さい場合は（9－4）



第9－20図　印加電圧の振幅を変えた場合の各ポテンシャル井戸における荷電粒子の挙動

16番目のポテンシャル井戸における電荷の時間的変化を調べたものである。計算は，$T=10.0$として行なわれたが，同図よりやはり印加電圧の振幅が小さくなるに従って電荷の変化は正弦波的に近い変動をしてゆくことがわかる。

さて以上より，印加電圧の振幅が小さくなる場合に，各位置における電荷の変動は正弦波的になることが明らかとなった。ここで，このような電荷の変動の正弦波印加電圧に対する各位置の位相差について調べてみる。そのためには，例えば1番目のポテンシャル井戸における電荷の変動については第9-20図，(a)で示されたように，印加電圧が最大となる時間t_1と，電荷量の大きさが最大となる時間t_2を定めて，時間差$\Delta t_b = t_2 - t_1$を求めれば，次式より位相差$\Delta\varphi_1$を定めることができる。

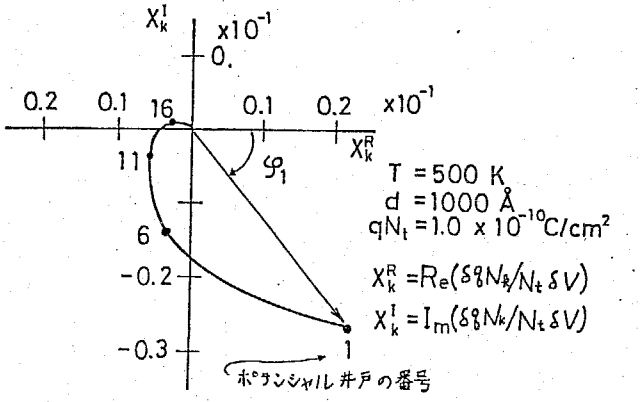
$$\Delta\varphi_1 = 2\pi \cdot \frac{1}{T} \cdot \Delta t_b \qquad \cdots\cdots (9-38)$$

さて，小信号解析で第9-20図で示したように，各位置の電荷変動の位相平面解析を行なったが，この位相平面より求められる位相遅れと，(9-38)式より求められる位相遅れを各位置について比較してみる。第9-1表は，上記の方法により両者を求めて比較したものである。表中のAC解析と記した欄のものが，(9-38)式より求めたもので，誘電分散と記した欄のものは第9-22図における位相平面より算出した結果を示している。両者ほぼ等しい値となることがわかる。

井戸の番号	誘電分散	A.C. 解析	
	φ	Δt_b	$\Delta\varphi$
1	0.278 π (rad)	14.0	0.28 π (rad)
2	0.550 π (rad)	28.0	0.56 π (rad)
3	0.846 π (rad)	42.0	0.84 π (rad)
4	1.128 π (rad)	50.0	1.00 π (rad)

第9-1表　誘電分散と交流定常解の計算例の比較

以上より，印加する電圧の振幅を小さくしてゆく場合に，試料中の各位置における電荷の変動が正弦波的になること，また各位置の位相遅れが（9－4）式を仮定して求めたものと一致することから，小信号を加えて誘電特性を計算する際に（9－4）式を仮定した前報の結果が妥当であると考えられる。



第9－22図　試料内の各位置における振幅と位相

9．8　まとめ

本章の前段では，ホッピング数値計算法により小信号の交流に対するイオン空間電荷分極による誘電分散や吸収現象を拡散と空間電荷電界をともに考慮して解析する方法を示し，クラマス－クローニッヒの関係を導いた。その結果，この分極にみられる低周波領域で誘電率の大きくなる特徴や，バイアス電圧によって分散曲線の変位する現象などが説明された。ここでは，試料内に単一の過剰イオンの存在する場合としたが，ホッピング数値解析法の有効性から考えて，その他固定電荷のある場合は勿論のこと，電極界面でイオン電荷の交換があるときも取扱うことが可能と考えられる。[80)~(83)] また，数値計算例としては，薄い試料の場合を扱かったが，厚い試料に高電圧を印加した時も同様に第3章の結果を用いて扱かえる。

本章の後段では，大信号の交流が印加された場合について誘電特性の解析を行なった。その結果，定常電流波形に特徴のある歪み波形が生ずることが，試料内の電荷の挙動から理解された。また印加する交流電圧の振幅を増加してゆくとき，振幅によって $\tan\delta$ に最大値を生ずるいわゆるガルトン効果が現われることも明らかにした。さらに，位相解析より小信号の場合との関係も明ら

かにした。ここでの大信号解析では，電圧が正弦波的に変化する交流定常解析のみを示したが，他の周期的な電圧を印加した場合の解析などが同様にして容易に行なえる。そして，計算はホッピングモデルにその基礎を置いているので，交流印加の場合の電子伝導の解析も行なえることは定常解析の場合と同様であろう。

第 10 章　一般絶縁材料の空間電荷分極による誘電分極の解析[13]

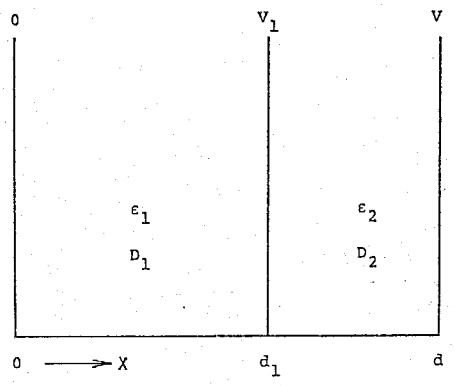
10-1. まえがき[13]

異種誘電体の境界面に電荷が蓄積されることによって生ずる分極は界面分極と呼ばれてよく知られている。そして，このような分極現象の起こる原因は，誘電体が誘電率および電導率に関して不均質な部分から成り立っているとき，可動イオンや電子などのキャリアが各々の部分で異なる速度で移動することによるものであることが明らかとなっている。Maxwell-Wagnerの不均質誘電体の理論は，上記の誘電体中の不均質構造が誘電緩和現象の原因となり得ることを初めて理論的に明らかにしたもので，以後この種の問題を扱う上での基本となっている。この理論は，不均質な各部分を異なった誘電率および電導率で記述することによって扱うものであるが，今迄に数多くの複合絶縁材料系などについての実験や各種の現象が説明されている。けれども，この理論は不均質な各部分を異なる誘電率と電導率で扱うのであるから，実質的にキャリアの作る空間電荷電界や拡散の問題は考慮されていないと言えるであろう。界面分極が異種誘電体中を移動する荷電粒子（イオン，電子）によるならば，キャリアの移動はポアソンの式によって定まる空間電荷電界のもとでのドリフトと拡散で決まるであろうから，このような電導を示す式によって界面分極現象を扱うことがむしろ自然であろう。そして，複合絶縁材料系で空間電荷が問題となる場合には，この扱かいは一層重要となろう。

本章ではこのような立場から，前章までに上記の問題を扱うのに有効であることが明らかとなったホッピング数値計算法を用いて複合絶縁材料系の扱いを試みる。そして，まず複合絶縁材料系としては最も簡単な二層誘電体について述べ，次いで多層誘電体に拡張する考え方を示す。以上のホッピング数値計算法による複合絶縁系の扱いは，他の複合系を取扱う際の基礎となるであろう。

10-2 二層誘電体に対するホッピング数値計算法の扱い

本章で扱かう二層誘電体は第10-1図に示されるものとし，以下の条件を仮定する。



第10-1図 二層誘電体の形状

(1) 誘電体中のキャリアは，単一な過剰の可動イオンとする。

(2) $x=0$，$x=d$ の位置の電極はイオンに対してブロッキングである。

(3) 誘電体I，IIの境界 $x=d_1$ の位置では，可動イオンの移動は自由である。

(4) $x=0$，$x=d$ の位置の電位を0，V（印加電圧）とする。

(5) 誘電体I，IIの誘電率および拡散定数をそれぞれ ε_1，ε_2，D_1，D_2 とする。

(6) 誘電体I，II内に含まれる全イオン量は N_t である。

以上の条件のもとでホッピング数値計算法を用いた解析の基本式を導くが，その前に，試料内の電荷分布 $\rho(x)$ が与えられるとき，ポアソンの式を解くことにより電位 $\phi(x)$ を求めておく必要がある。

<10-2-1> 試料内の電位

$x=d_1$ の電位を V_1 とすれば，付録5-1表を参照して次のようになる。

(i) $0 \le x \le d_1$ の場合

$$\phi(x) = \frac{V_1}{d_1}x + \frac{d_1 - x}{d_1}\int_0^x x\frac{\rho(x)}{\varepsilon_1}dx + \frac{x}{d_1}\int_x^{d_1}(d_1-x)\frac{\rho(x)}{\varepsilon_1}dx \quad \cdots\cdots (10-1)$$

(ii) $d_1 \le x \le d$ の場合

$$\phi(x) = \frac{d-x}{d-d_1}\int_{d_1}^{x}(x-d_1)\frac{\rho(x)}{\varepsilon_2}dx + \frac{x-d_1}{d-d_1}\int_{x}^{d}(d-x)\frac{\rho(x)}{\varepsilon_2}dx + \frac{x-d_1}{d-d_1}(V-V_1)+V_1 \quad \cdots\cdots(10-2)$$

$x=d_1$ における電位 V_1 は，試料内に含まれる全イオン量が qN_t であるとする条件により，電束の連続条件から次のようにして定められる。付録5－1表を参照して，$x=0$ における電束 $D(0)$ は，

$$D(0) = \varepsilon_1 E(0) = \int_0^{d_1}\frac{x-d_1}{d_1}\rho(x)dx - \frac{\varepsilon_1}{d_1}V_1 \cdots(10-3)$$

$x=d$ における電束 $D(d)$ は，

$$D(d) = \varepsilon_2 E(d) = \int_{d_1}^{d}\frac{x-d_1}{d-d_1}\rho(x)dx - \frac{\varepsilon_2}{d-d_1}(V-V_1) \quad \cdots\cdots(10-4)$$

また，試料内に含まれる全イオン量は qN_t であるから，

$$D(d)-D(0) = qN_t \quad \cdots\cdots(10-5)$$

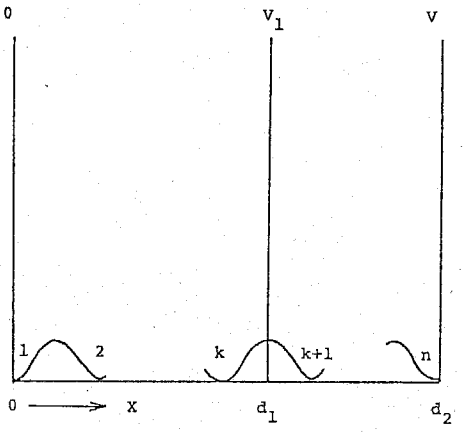
$(10-3)\sim(10-5)$ 式を解けば，

$$V_1 = \frac{\displaystyle\int_{d_1}^{d}\frac{d-x}{d-d_1}\rho(x)dx + \int_0^{d_1}\frac{x}{d_1}\rho(x)dx + \frac{\varepsilon_2 V}{d-d_1}}{\dfrac{\varepsilon_2}{d-d_1} + \dfrac{\varepsilon_1}{d_1}} \quad \cdots\cdots(10-6)$$

以上より，電圧 V が印加された時，$(10-1)$，$(10-2)$，$(10-6)$ 式を用いて試料内の任意の点の電位が求められることがわかる。

ホッピング数値計算法を適用する場合，$(10-1)$，$(10-2)$，(1

0－6）式はそのまま用いられず，同計算法での表示式で表わさなければならない。この操作は付録5で述べた様に行なえばよいが，その際，試料内にどのようなモデルを設定するかが問題となる。本章では，第10－2図に示すように，$x=0$，dの電極ではポテンシャル井戸が，また$x=d_1$ではポテンシャルの山があると考えた。そして，試料内にはn個のポテンシャル井戸があり，$x=d_1$の位置は$x=0$よりkとk＋1番目の井戸の間とした。



第10－2図　二層誘電体に対するホッピング数値計算法の扱い

以上のように考えると，試料内のj番目の井戸の電位ϕ_jは以下のようになる（（10－1），（10－2），（10－6）式を用いる）。

（i）$0 \le x \le d_1$，すなわち$1 \le j \le k$

$$\phi_j = \frac{8N_t}{\varepsilon_1}\left\{\frac{k-j+0.5}{k-0.5}\sum_{i=1}^{j}(i-1)\ell\frac{N_i}{N_t} + \frac{j-1}{k-0.5}\sum_{i=j+1}^{k}(k-i+0.5)\ell\frac{N_i}{N_t}\right\} + \frac{j-1}{k-0.5}V_1 \quad \cdots\cdots (10-7)$$

（ii）$d_1 \le x \le d$，すなわち$k+1 \le j \le n$

$$\phi_j = \frac{8N_t}{\varepsilon_2}\left\{\frac{n-j}{n-k-0.5}\sum_{i=k+1}^{j}(j-k-0.5)\ell\frac{N_i}{N_t} + \frac{j-k-0.5}{n-k-0.5}\sum_{i=j+1}^{n}(n-i)\ell\frac{N_i}{N_t}\right\} + \frac{j-k-0.5}{n-k-0.5}(V-V_1) + V_1 \quad \cdots\cdots (10-8)$$

ただし，

$$V_1 = \frac{\dfrac{8N_t}{\varepsilon_1}\left\{\displaystyle\sum_{i=1}^{k}\frac{i-1}{k-0.5}\frac{N_i}{N_t} + \sum_{i=k+1}^{n}\frac{n-i}{n-k-0.5}\frac{N_i}{N_t}\right\} + \dfrac{V}{(n-k-0.5)\varepsilon_1}}{(n-k-0.5)^{-1}(\varepsilon_1/\varepsilon_2)^{-1} + (k-0.5)^{-1}}$$

・・・・・・(10-9)

また，N_i は i 番目の井戸の数，l はホッピング距離である。

<10-2-2> 基本方程式

第10-2図を参照して基本方程式を作成するが，その際，(1)～(6)の条件は式中に代入される。作成方法は前章までに述べた通りで，結果は次のようになる。ただし，N_j の j など添字は，$x=0$ の位置より j 番目のポテンシャル井戸を表わしている。

$$\begin{cases} dN_1/dt = -\omega_{1,2} N_1 + \omega_{2,1} N_2 \\ dN_j/dt = \omega_{j-1,j} N_{j-1} - (\omega_{j,j-1} + \omega_{j,j+1}) N_j + \omega_{j+1,j} N_{j+1} \quad (2 \le j \le k-1) \\ dN_k/dt = \omega_{k-1,k} N_{k-1} - (\omega_{k,k-1} + \omega_{k,k+1}) N_k + \beta \omega_{k+1,k} N_{k+1} \\ dN_{k+1}/dt = \omega_{k,k+1} N_k - (\beta \omega_{k+1,k} + \beta \omega_{k+1,k+2}) N_{k+1} + \beta \omega_{k+2,k+1} N_{k+1} \\ dN_j/dt = \beta \omega_{j-1,j} N_{j-1} - (\beta \omega_{j,j-1} + \beta \omega_{j,j+1}) N_j + \beta \omega_{j+1,j} N_{j+1} \quad (k+2 \le j \le n-1) \\ dN_n/dt = \beta \omega_{n-1,n} N_{n-1} - \beta \omega_{n,n-1} N_n \end{cases}$$

・・・・・・(10-10)

ただし β は，ホッピングモデルにおいて拡散定数 D_1，D_2 は

$$\left.\begin{aligned} D_1 &= \nu_1 l_1^2 \exp(-W_1/kT) \\ D_2 &= \nu_2 l_2^2 \exp(-W_2/kT) \end{aligned}\right\} \quad \cdots\cdots(10-11)$$

となるが，これらの比を示し，$l_1 = l_2 = l$ として，

$$\beta = D_2/D_1 \qquad \cdots\cdots(10-12)$$

であるとする。また，$\omega_{j,j+1}$，$\omega_{j+1,j}$ などは今迄述べてきたように遷移確率を表わしており，

$$\omega_{j,j+1} = \nu \exp\left(-\frac{W_i}{kT}\right) \exp\left(-\frac{g}{kT}(\phi_{j+\frac{1}{2}} - \phi_j)\right)$$

$$\omega_{j+1,j} = \nu_1 \exp\left(-\frac{W_1}{kT}\right) \exp\left(-\frac{q}{kT}\left(\phi_{j+\frac{1}{2}} - \phi_{j+1}\right)\right)$$

・・・・・(10-13)

ここで，ν_1，W_1は誘電体I内のイオンの振動数およびポッピングの山の高さである。

以上，(10-10)，(10-13)式と(10-7)～(10-9)式で与えられるϕ_jの式さ用いれば誘電体の種々の現象つまり定常解析や過渡解析，さらに誘電特性の解析が行なえる。次節では，これらの中で定常解析が試みられる。

10-3 定常解析と数値計算例

<10-3-1> 定常解析

定常状態の解析を行なうためには，(10-10)式の左辺の時間項を零と置いて得られる式

$$\omega_{j,j+1} N_j = \omega_{j+1,j} N_{j+1} \quad (j \neq k,\ 1 \leq j \leq n-1)$$
$$\omega_{k,k+1} N_k = \beta \omega_{k+1,k} N_{k+1} \quad (j = k)$$

・・・・・(10-14)

を解けばよい。その方法は第3章5節で述べたニュートン法などの収束計算によればよい。以下では，同計算法による解析結果について述べるが，それに先だち(10-14)式から，後に扱かう多層誘電体との関連からN_jをϕ_j($j=1, 2, \cdots, n$)の関数として求めておこう。その結果は(3-14)式と同様で，$\phi_1 = 0$として次のように整理される。

(i) $1 \leq j \leq k$の場合

$$\frac{N_j}{N_t} = \frac{\exp\left(-\frac{q}{kT}\phi_j\right)}{\sum_{j=1}^{k} \exp\left(-\frac{q}{kT}\phi_j\right) + \frac{1}{\beta}\sum_{j=k+1}^{n} \exp\left(-\frac{q}{kT}\phi_j\right)}$$

・・・・・(10-15)

(ii) $k+1 \leq j \leq n$ の場合

$$\frac{N_j}{N_t} = \frac{\frac{1}{\beta}\exp\left(-\frac{q}{kT}\phi_j\right)}{\sum_{j=1}^{k}\exp\left(-\frac{q}{kT}\phi_j\right) + \frac{1}{\beta}\sum_{j=k+1}^{n}\exp\left(-\frac{q}{kT}\phi_j\right)} \quad \cdots\cdots (10-16)$$

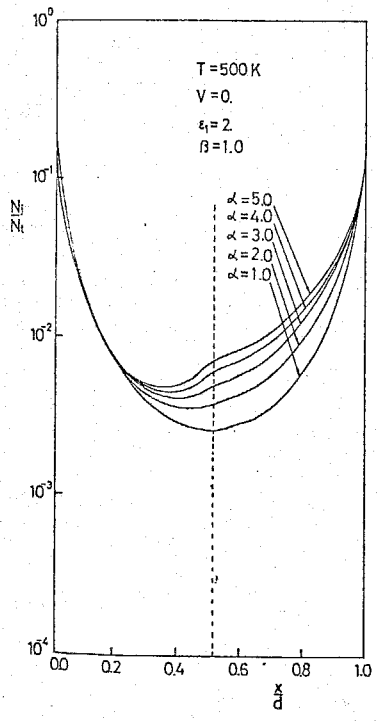
<10-3-2> 数値計算例

前節で得られた基本式（10-14）と試料内の全電荷量を qN_t として，

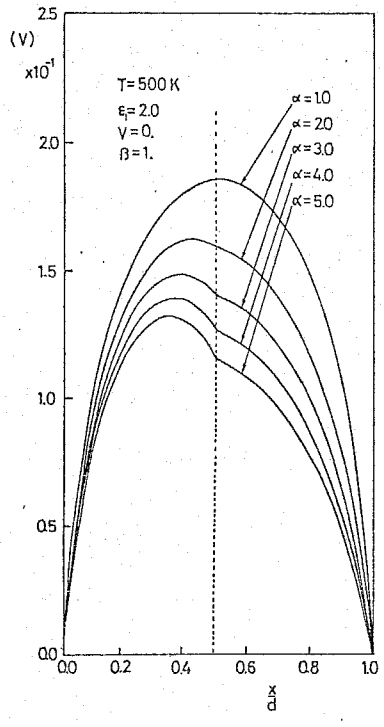
$$qN_t = \sum_{j=1}^{n} N_j \quad \cdots\cdots (10-17)$$

なる関係式を用いて数値解析を試みた。計算は試料の半分の所で誘電体が接するとし，β と α（$=\varepsilon_2/\varepsilon_1$）をパラメータとして，$qN_t = 1.0\times10^{-6}$ C/cm² の条件のもとで行なった。ただし，$\varepsilon_1 = 2.0$ とし，試料を50等分（$n=50$，$k=25$），$d=1000$ Åと考えている。

第10-3図は，印加電圧Vを0Vとし，$\beta=1.0$ の条件のもとでαを変

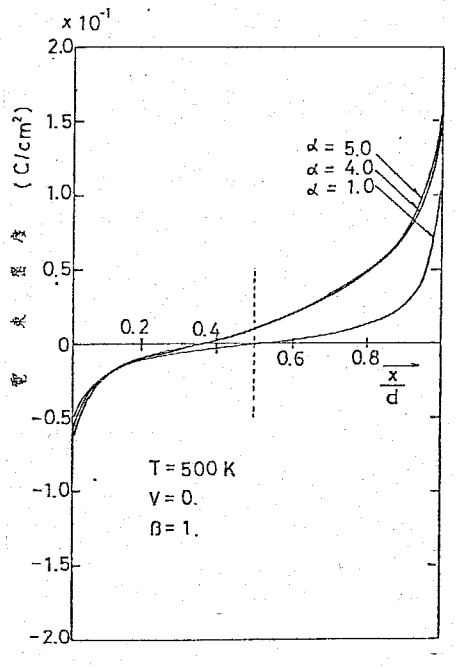


第10-3図 試料内の電荷分布の計算例（$\beta=1$）

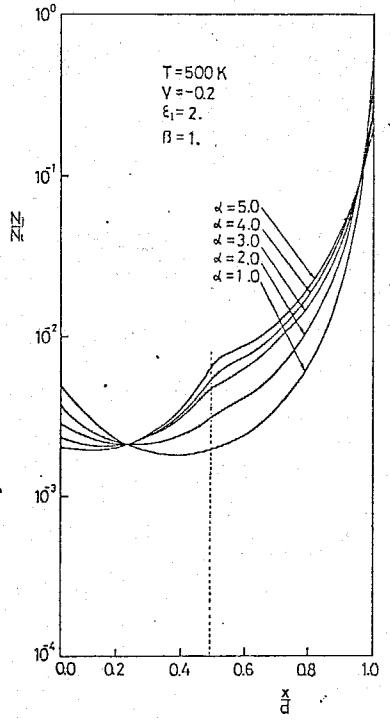


第10-4図 試料内の電位分布の計算例（$\beta=1$）

えた場合の電荷分布を示している。同図より，誘電率の差に伴ない電荷分布は試料内で非対称となっていることがわかる。また，第10－4図はその場合の電位分布でやはり非対称となっている。このような電荷分布や電位分布が非対称となる原因は誘電率の差が，（10－7），（10－8）式のポテンシャル ϕ_j に反映され，（10－13）式で記述する遷移確率に異なった影響を与えるためと考えられよう。第10－5図は同様に第10－3図に対する試料内の電束密度の分布を表わしている。やはり試料内では $\alpha = 1.0$ の場合は対称となるが，その他の場合は非対称となっている。以上述べてきたように，二層誘電体内の誘電率の差は印加電圧が零の場合にもすでに電荷分布が非対称となるなど，その効果は単一の誘電体を扱かった第3章の場合とは極めて異なっている。また，本章で扱かうイオン空間電荷の場合には，界面に電荷が蓄積されると言うよりはむしろ電荷が試料内で再分布するとみられる。第10－6図は電圧を印加した場合の試料内の電荷分布を表わしている。この場合も $\alpha = 1.0$

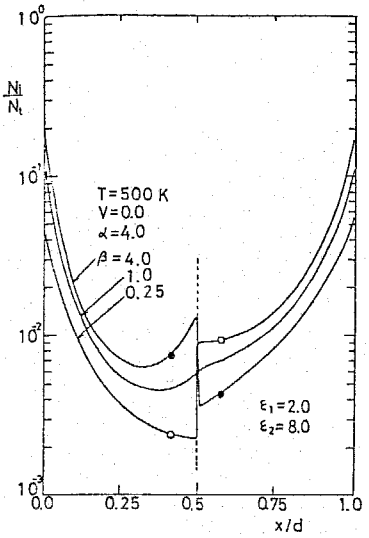


第10－5図　試料内の電束密度
（$D = \varepsilon E$）

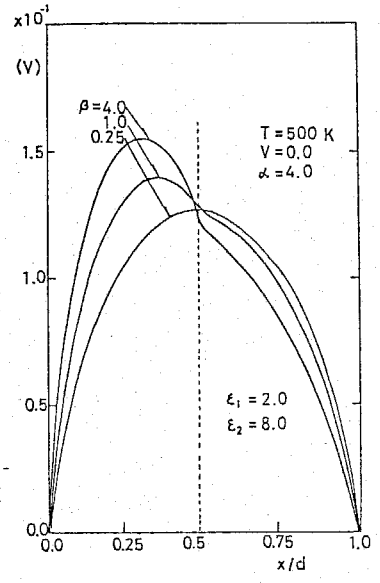


第10－6図　電圧を印加した場合の試料内の電荷分布（$\rho = 1$）

の場合の電荷分布と比較すれば，誘電率の差は端的にあらわれている。



第10－7図　試料内電荷分布の計算例（α＝4．0）



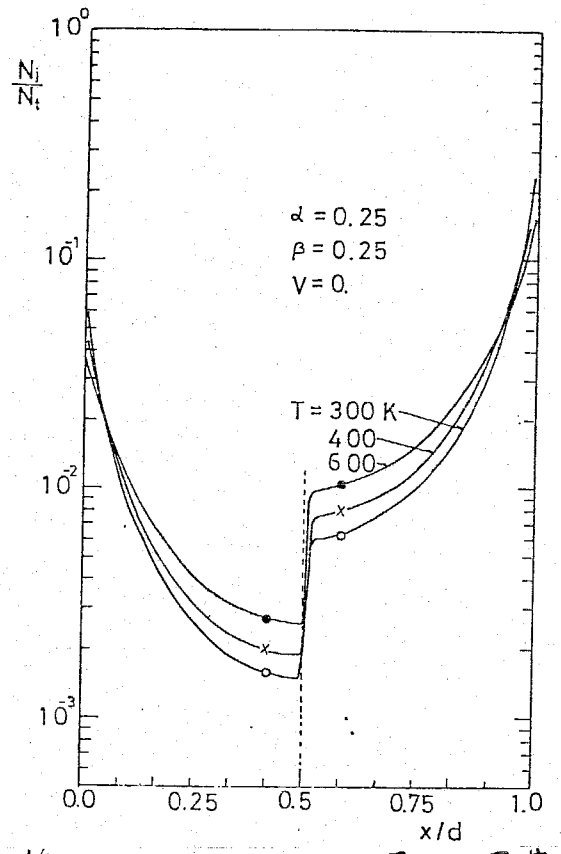
第10－8図　試料内電位分布の計算例（α＝4．）

第10－7，8図は，α＝4．0としてβを変えた場合の印加電圧が零における電荷分布および電位分布を示している。結果は，第10－3，4図と比較すれば境界面付近で大きな差となっている。すなわち，境界面付近では電荷の分布は急激な変化をしている。このような電荷分布の急激な変化は，（10－15），（10－16）式を用いればおおよそ次のように考えることができる。第10－8図をみると電位分布もやはり境界面で特有の変化をしているが，誘電体Ⅰ，Ⅱの境界面に一番近いk および k＋1番目のポテンシャル井戸の電位はほぼ等しいとみて ϕ_s と置く。そのように考えると（10－15），（10－16）式の分母は等しいのであるから，両式より次の関係式が得られる。

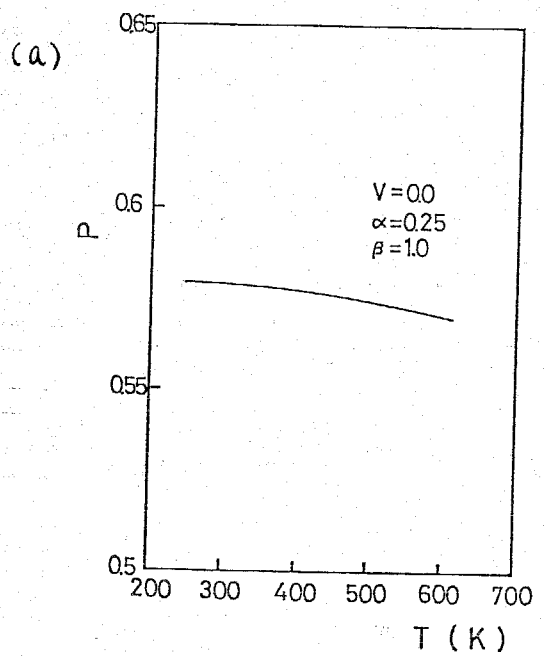
$$\frac{N_k}{N_t} \fallingdotseq \frac{1}{\beta} \cdot \frac{N_{k+1}}{N_t} \qquad \cdots\cdots (10-18)$$

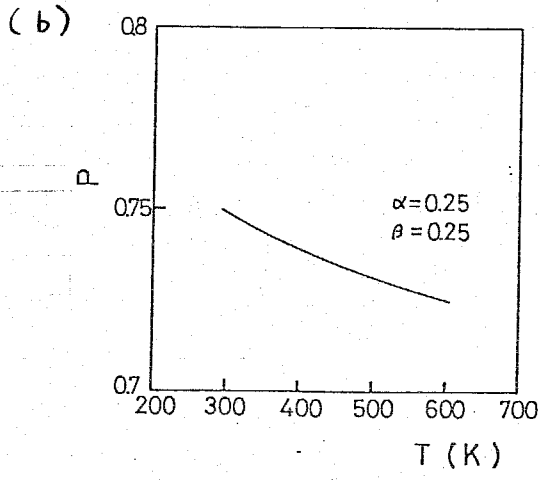
従って，βの差，すなわち拡散定数（移動度と考えても同様）の差は界面付近で電荷分布に大きな差を生じさせるものと考えることができる。例えばβ＝4．

0の場合では，第10－7図に示されるようにほぼ4倍の差がみられる。以上の様に，二層誘電体に対して試料内の誘電率や拡散定数の差異を考えると，その結果は電荷分布の仕方に現われるであろうことが明らかになった。ところで，このような場合の試料内の温度変化による電荷分布特性や分極量を求めることは極めて興味深い。第10－9図に$\alpha=\beta=0.25$とした場合の電荷分布の温度特性を示したが，温度上昇と伴に電荷が試料境界面側に寄って，その非対称性が緩和される傾向がみられる。電荷分布の非対称性の緩和は分極量の温度依存性として現われるであろう。そこで，このことを確かめるために第10－10図(a)(b)では，それぞれ$\alpha=0.25$，β



第10－9図　二層誘電体の電荷分布の温度特性





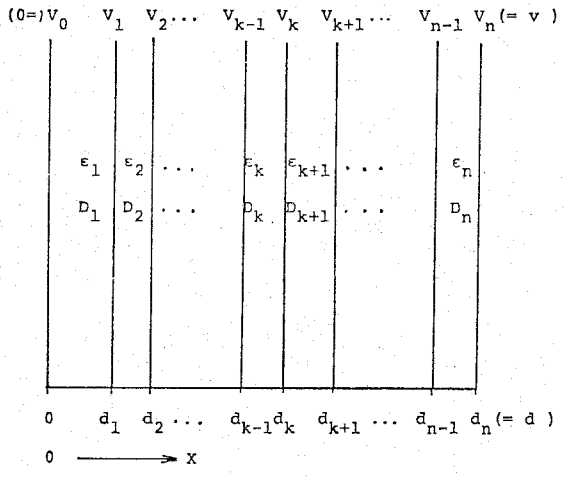
第10－10図　二層誘電体の分極量の温度特性(a) $\alpha=0.25$，$\beta=1.0$ (b) $\alpha=\beta=0.25$

=1，0と$\alpha=\beta=0.25$の場合についてこのことを調べた。同図よりV=0であるにもかかわらず，分極量が変化していることがわかるであろう。このことは二層誘電体のみならず一般の複合誘電体で，空間電荷分極が問題となる場合の自発分極の可能性を示唆しているとみられよう。このようなことは単一の誘電体では考えられず，二層誘電体（多層の場合も同じ）の特徴と言えると思われるが，今後さらに検討を加える必要があろう。以上で二層誘電体の扱かいを終わるが，次章では今迄の解析を基盤として多層誘電体に拡張する。

10－4　多層誘電体の扱かい

本節では，前節までに得られた結果をもとにして多層誘電体の扱かいを示す。解析の手順などは同じであるので結果のみ示す。

本節で扱かう多層誘電体の形状は第10－11図の通りであるとする。また，境界面の電位も第10－11図に示される通りとする。同図のように試料の各諸量を考えるとき，各層の境界面の電位は，試料内の電荷分布$\rho(x)$が与えられたとき，次の漸化式によって示される。



第10－11図
多層誘電体の試料形状

$$V_j - V_{j-1} = A_j + B_j (V_{j+1} - V_{j-1})$$

$$(j = 1, 2, \cdots, n-1)$$

ただし，

$$V_0 = 0$$

$$V_n = V$$

$$A_j = \frac{\displaystyle\int_{d_j}^{d_{j+1}} \frac{d_{j+1}-x}{d_{j+1}-d_j}\rho(x)\,dx + \int_{d_{j-1}}^{d_j} \frac{x}{d_j-d_{j-1}}\rho(x)\,dx}{\dfrac{\varepsilon_{j+1}}{d_{j+1}-d_j} + \dfrac{\varepsilon_j}{d_j-d_{j-1}}}$$

$$B_j = \frac{\dfrac{\varepsilon_{j+1}}{d_{j+1}-d_j}}{\dfrac{\varepsilon_{j+1}}{d_{j+1}-d_j} + \dfrac{\varepsilon_j}{d_j-d_{j-1}}}$$

・・・・・(10-19)

従って，(10-19)式を用いれば，$V_0 = 0$，$V_m = V$が与えられると各層境界の電位が定められることになる。そして，各層境界の電位が定められた時，$j+1$番目の層内の電位$\phi(x)$は次の様になる。

$$\phi(x) = \frac{d_{j+1}-x}{d_{j+1}-d_j}\int_{d_j}^{x}(x-d_j)\frac{\rho(x)}{\varepsilon_{j+1}}dx + \frac{x-d_j}{d_{j+1}-d_j}\int_{x}^{d_{j+1}}(d_{j+1}-x)\frac{\rho(x)}{\varepsilon_{j+1}}dx + \frac{x-d_j}{d_{j+1}-d_j}(V_{j+1}-V_j) + V_{j+1}$$

・・・・・(10-20)

従って，(10-19)，(10-20)式を用いて，10-2節で述べた手順でホッピング数値計算法に必要な表示式が得られる。

後は，試料内の電荷の挙動を示す基本式の作成であるが，これも(10-10)式とほとんど変わりない。すなわちj層内の境界を含まない部分では，

$$dN_{i'}/dt = \beta_j \omega_{i'-1,i'} N_{i'-1} - (\beta_j \omega_{i',i'-1} + \beta_j \omega_{i',i'+1}) N_{i'} + \beta_j \omega_{i'+1,i'} N_{i'+1} \quad \cdots\cdots (10-21)$$

で表わされ，j層とj＋1層の境界のj層内では次のようである。

$$dN_{i'}/dt = \beta_j \omega_{i'-1,i'} N_{i'-1} - (\beta_j \omega_{i',i'-1} + \beta_j \omega_{i',i'+1}) N_{i'} + \beta_{j+1} \omega_{i'+1,i'} N_{i'+1} \quad \cdots\cdots (10-22)$$

ただしβ_j, β_{j+1}はそれぞれj層，j＋1層の1層目に対する拡散定数の比を表わしている。

以上のように多層となった場合にも，二層の場合と同様に扱かえることになる。前節で行なった定常解析の時は上記の時間項を零として考えることはこの場合も同様である。そのようにして得た基本式より（10－15），（10－16）式に相当する関係式を導くと，その結果は次のようになる。

$$\frac{N_{i'}}{N_t} = \frac{\frac{1}{\beta_j}\exp\left(-\frac{\delta}{kT}\phi_{i'}\right)}{\sum_{i_1}\frac{1}{\beta_1}\exp\left(-\frac{\delta}{kT}\phi_{i_1}\right) + \sum_{i_2}\frac{1}{\beta_2}\exp\left(-\frac{\delta}{kT}\phi_{i_2}\right) + \cdots\cdots + \sum_{i_n}\frac{1}{\beta_n}\exp\left(-\frac{\delta}{kT}\phi_{i_n}\right)}$$

ただし上式で，i'はj番目の層内におけるi'の位置を示し，$\sum_{i'_k}$はk番目の層内の各ポテンシャル位置の総和を表わしている。

以上，多層誘電体についての扱かいと定常状態の解析を示したが，二層の場合についての数値解析と同様の手順によってこれらも取扱えると考えられる。

10－5　まとめ

本章では，一般誘電材料として複合誘電体を取上げて，空間電荷と言う立場からみた場合の扱かいをイオン空間電荷を仮定して示した。すなわち，二層誘電体に対してホッピング数値計算法を適用し，誘電体試料内での電荷特性の問題を扱かった。その結果，試料内での電荷は（10－15），（10－16）式によって分布するものであることが示され，また実際に数値計算を行ない分布特性も求めた。さらに，これらを多層誘電体に拡張する考え方も明らかにし

た。以上より複合絶縁系で空間電荷を考えると，試料内の電荷分布という新しい問題を含んでくることが予想される。本章での研究は，さらに実際の実験資料とも対応させながら検討してゆく必要があろう。また，(10-10)式のようにホッピングの基本式が導かれ，試料内の電位も関数として求められていることから前章での誘電特性の解析も行なえることは明らかであろう。次章では，この問題も含め，一般の誘電体に対する誘電特性の解析を示す。

第 11 章　一般誘電体材料における空間電荷分極による誘電分散に関する研究

11-1 まえがき

空間電荷分極による誘電分散現象の特徴は，双極子分極によるものと異なり特性が材料の形状によっても変化することであろう。その理由は，空間電荷分極は試料内における荷電粒子の挙動によっており，その場合，粒子は試料内で拡散と空間電荷電界によるドリフトで大きく移動して動くからである。そのために双極子分極の場合と異なり，例えばフィルム状試料で行なった解析や測定結果を直ちにケーブルなどの円筒形状試料に対して適用することはできず，与えられた形状のまま取扱う必要がある。

本章では，第9章で述べた一次元誘電体材料に対する小信号解析を，任意形状の誘電体材料に拡張する基本的な考え方を示す。そして，一次元の場合と同様に誘電率 ε' と誘電損率 ε'' の間には，よく知られているクラマース・クローニッヒの関係が成立することを明らかにする。(13)

本章で誘電特性の解析を拡張する理由は以下のようである。まず第一に，空間電荷分極についての物性的な興味からであり，双極子分極などの特徴と対比できるようにするためである。第二には，実用上の問題からで，例えば電力ケーブルについては損失を正しく評価するためには空間電荷分極による誘電損失も考慮しなければならないと思われるが(50)~(51)，これを解決できるようにすること，また，半導体デバイスでは高速化や高密度化に伴なって素子の周波数特性を正しく予測したり評価することが重要であると考えられるが，これら諸特性を求めるための基本的な考え方を示すことである。(20)

11-2 一般誘電体材料系に対するホッピング数値計算法の基本式

ホッピング数値計算法で記述される試料内の荷電粒子の挙動を示す方程式は，第2章で述べたように座標系に左右されず，その基本構造も変化しない。すな

わちホッピング数値計算法で基本方程式を作成するためには，与えられた試料を区分領域に分割し，領域間における粒子の交換や遷移確率を表わす因子により結びつけてゆけばよい。その場合，一次元，二次元，三次元のいずれの解析を行なうかは扱かう対象によって決めればよい。従って任意形状の試料についてn個の区分領域に分割した場合，それらに1，2，・・・，nなる番号付けをして各領域内に含まれる電荷数をN_1，N_2，・・・，N_nで表わせば，その基本方程式は下式で示される。

$$\frac{d}{dt}\mathbb{N} = \mathbb{W}(\vec{r})\cdot\mathbb{N} + \mathbb{C}(\vec{r}) \quad \cdots\cdots (11-1)$$

ここで$\mathbb{N}$は，$\mathbb{N}^T = (N_1, N_2, \cdots, N_n)$なるマトリクスである。この場合，各成分は各領域内に含まれる全電荷数を表わしていると考えれば，領域の幾何学的な情報はこの中に入っている。従って，領域内の電荷密度ρ_iを求めるためには，領域の体積をV_i（二次元の場合には面積）として$\rho_i = qN_i/V_i$より算出する。$\mathbb{C}$は$\mathbb{C}^T = (C_1, C_2, \cdots, C_n)$なるマトリクスであり，各成分は各領域内の電荷の発生や外部からの電荷注入の効果を示している。例えば，外部から試料内への電荷の注入もなく，試料内で電荷の発生もない場合は，$\mathbb{C}^T = (0, 0, \cdots, 0)$なる零行列で示される。そして，（11－1）式では，$\mathbb{C}$を$\vec{r}$の関数，つまり各領域のポテンシャル関数として表示したが，これは電荷の注入などが試料内の空間電荷の影響を受けることを考慮したことを意味している。電荷の注入特性などに対しても空間電荷の影響を考慮することについては第7章で既に触れている。また，$\mathbb{W}(\vec{r})$は，領域間の遷移を表わす成分からなるマトリクスで以下のようである。

$$\mathbb{W}(\vec{r}) = \begin{vmatrix} W_{1,1}, W_{1,2}, \cdots, W_{1,n} \\ W_{2,1}, W_{2,2}, \cdots, W_{2,n} \\ \cdots\cdots\cdots \\ \cdots\cdots\cdots \\ W_{n,1}, W_{n,2}, \cdots, W_{n,n} \end{vmatrix} \quad \cdots\cdots (11-2)$$

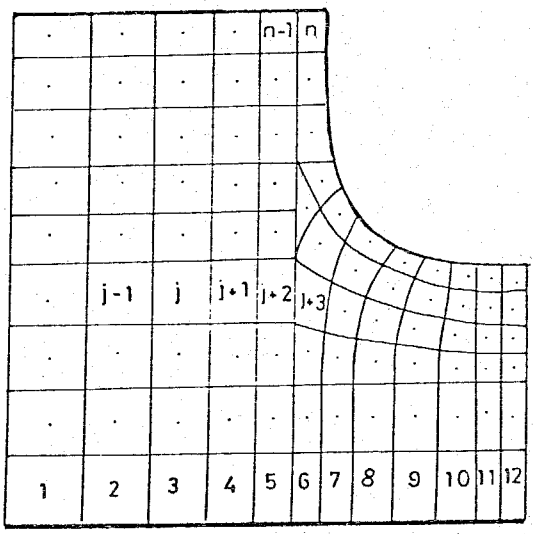
ただし，$W_{i,j}$ は領域 i より領域 i 以外への遷移と，領域 i 以外から領域 i への遷移の和で表わされるが，$\omega_{i,j}$ を領域 i から領域 j への遷移確率として

$$W_{i,j} = -\sum_{k=1}^{n} \omega_{i,k} + \sum_{k=1}^{n} \omega_{k,i} \quad \cdots\cdots (11-3)$$

ただし，領域 i と領域 j とが接続されていない場合には，$\omega_{i,j} = 0$ である。また，$\omega_{i,j}$ は空間電荷電界の影響を受け，それらは試料内のポテンシャル亜の関数で示されることから，$W_{i,j}$ も同様に下式で表わされるようにポテンシャルの関数である。

$$W_{i,j} = W_{i,j}(\varphi_1, \varphi_2, \cdots, \varphi_n) \cdots (11-4)$$

以上のようにして，(11-1)式で荷電粒子の挙動を示すホッピングの基本方程式を作成できることが明らかとなった。なお，第11-1図には，二次元で表わされる試料を取り上げて領域分けと番号付けを示した。



第11-1図
二次元試料の分割と番号付け

11-3 一般誘電体材料に対する小信号解析

(11-1)式を用いて小信号解析を行なうが，第9章と同様に次の変換をして考える。

$$N \rightarrow N^{\circ} + \delta N$$

$$\text{亜} \rightarrow \text{亜}^{\circ} + \delta \text{亜}$$

$$\frac{d}{dt} \rightarrow j\omega$$

・・・・・(11-5)

ただし,

$$\delta N^T = (\delta N_1, \delta N_2, \cdots, \delta N_n)$$
$$N_0{}^T = (N_1^\circ, N_2^\circ, \cdots, N_n^\circ)$$
$$\delta \Phi^T = (\delta \phi_1, \delta \phi_2, \cdots, \delta \phi_n)$$
$$\Phi^{\circ T} = (\phi_1^\circ, \phi_2^\circ, \cdots, \phi_n^\circ)$$

で,肩の零は一次元の解析と同様定常値を示している。このような定常値の求め方については付録7に示しておいた。

(11-5)式を(11-1)式に代入して式を整理すれば,

$$j\omega \delta N = W(\Phi^\circ + \delta\Phi)\cdot(N^\circ + \delta N) + C(\Phi^\circ + \delta\Phi)$$

・・・・・(11-6)

となる。そこで,$W(\Phi^\circ + \delta\Phi)$について$\Phi^\circ$の近傍でTaylor展開を考えると,

$$W(\Phi^\circ+\delta\Phi) = \begin{bmatrix} W_{11}(\phi_1^\circ+\delta\phi_1, \phi_2^\circ+\delta\phi_2, \cdots, \phi_n^\circ+\delta\phi_n), & \cdots, & W_{1n}(\phi_1^\circ+\delta\phi_1, \phi_2^\circ+\delta\phi_2, \cdots, \phi_n^\circ+\delta\phi_n) \\ W_{21}(\phi_1^\circ+\delta\phi_1, \phi_2^\circ+\delta\phi_2, \cdots, \phi_n^\circ+\delta\phi_n), & \cdots, & W_{2n}(\phi_1^\circ+\delta\phi_1, \phi_2^\circ+\delta\phi_2, \cdots, \phi_n^\circ+\delta\phi_n) \\ \vdots & & \vdots \\ W_{n1}(\phi_1^\circ+\delta\phi_1, \phi_2^\circ+\delta\phi_2, \cdots, \phi_n^\circ+\delta\phi_n), & \cdots, & W_{nn}(\phi_1^\circ+\delta\phi_1, \phi_2^\circ+\delta\phi_2, \cdots, \phi_n^\circ+\delta\phi_n) \end{bmatrix}$$

$$
= \begin{Bmatrix}
W_{11}^{\circ} + \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial W_{11}}{\partial \phi_k} \delta\phi_k, & \cdots, & W_{1n}^{\circ} + \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial W_{1n}}{\partial \phi_k} \delta\phi_k \\
W_{21}^{\circ} + \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial W_{21}}{\partial \phi_k} \delta\phi_k, & \cdots, & W_{2n}^{\circ} + \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial W_{2n}}{\partial \phi_k} \delta\phi_k \\
\cdot, & \cdot, & \cdot \\
W_{n1}^{\circ} + \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial W_{n1}}{\partial \phi_k} \delta\phi_k, & \cdots, & W_{nn}^{\circ} + \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial W_{nn}}{\partial \phi_k} \delta\phi_k
\end{Bmatrix}
$$

$$
= \begin{Bmatrix}
W_{11}^{\circ}, W_{12}^{\circ}, \cdots, W_{1n}^{\circ} \\
W_{21}^{\circ}, W_{22}^{\circ}, \cdots, W_{2n}^{\circ} \\
\cdot, \cdot, \cdots, \cdot \\
W_{n1}^{\circ}, W_{n2}^{\circ}, \cdots, W_{nn}^{\circ}
\end{Bmatrix}
+ \sum_{k=1}^{n}
\begin{Bmatrix}
\frac{\partial W_{11}}{\partial \phi_k}, \frac{\partial W_{12}}{\partial \phi_k}, \cdots, \frac{\partial W_{1n}}{\partial \phi_k} \\
\frac{\partial W_{21}}{\partial \phi_k}, \frac{\partial W_{22}}{\partial \phi_k}, \cdots, \frac{\partial W_{2n}}{\partial \phi_k} \\
\cdot, \cdot, \cdots, \cdot \\
\frac{\partial W_{n1}}{\partial \phi_k}, \frac{\partial W_{n2}}{\partial \phi_k}, \cdots, \frac{\partial W_{nn}}{\partial \phi_k}
\end{Bmatrix}
\delta\phi_k
$$

$$
= \mathbb{W}^{\circ} + \frac{d\mathbb{W}}{d\mathbb{\Phi}} \cdot \delta\mathbb{\Phi} \qquad \cdots\cdots (11-7)
$$

ただし,

$$
\mathbb{W}^{\circ} = \begin{bmatrix}
W_{11}^{\circ}, & W_{12}^{\circ}, & \cdots, & W_{1n}^{\circ} \\
W_{21}^{\circ}, & W_{22}^{\circ}, & \cdots, & W_{2n}^{\circ} \\
\cdot, & \cdot, & \cdots, & \cdot \\
W_{n1}^{\circ}, & W_{n2}^{\circ}, & \cdots, & W_{nn}^{\circ}
\end{bmatrix}
$$

$$
\frac{d\mathbb{W}}{d\mathbb{\Phi}} = \left[\left(\frac{d\mathbb{W}}{d\phi_1}\right), \left(\frac{d\mathbb{W}}{d\phi_2}\right), \cdots, \left(\frac{d\mathbb{W}}{d\phi_n}\right) \right]
$$

$$
\delta\mathbb{\Phi}^{T} = \left[\delta\phi_1, \delta\phi_2, \cdots, \delta\phi_n \right]
$$

である。そのうち, $(d\mathbb{W}/d\phi_j)$ は次式を満足している。

$$\frac{d\mathbb{W}}{d\Phi_j} = \begin{bmatrix} \frac{\partial W_{11}}{\partial \Phi_j}, & \frac{\partial W_{12}}{\partial \Phi_j}, & \cdots, & \frac{\partial W_{1n}}{\partial \Phi_j} \\ \frac{\partial W_{21}}{\partial \Phi_j}, & \frac{\partial W_{22}}{\partial \Phi_j}, & \cdots, & \frac{\partial W_{2n}}{\partial \Phi_j} \\ \cdot, & \cdot, & \cdots, & \cdot \\ \frac{\partial W_{n1}}{\partial \Phi_j}, & \frac{\partial W_{n2}}{\partial \Phi_j}, & \cdots, & \frac{\partial W_{nn}}{\partial \Phi_j} \end{bmatrix}$$

また，$\mathbb{C}(\mathbb{亜}^\circ + \delta\mathbb{亜})$についても同様に$\mathbb{亜}^\circ$の近傍でTaylor展開を考えれば，

$$\mathbb{C}(\mathbb{亜}^\circ + \delta\mathbb{亜}) = \mathbb{C}(\mathbb{亜}^\circ) + \tilde{\mathbb{C}} \cdot \delta\mathbb{亜} \quad \cdots (11-8)$$

ただし，$\tilde{\mathbb{C}}$は，

$$\tilde{\mathbb{C}} = \left[\frac{\partial \mathbb{C}}{\partial \Phi_1}, \frac{\partial \mathbb{C}}{\partial \Phi_2}, \cdots, \frac{\partial \mathbb{C}}{\partial \Phi_n} \right] \quad \cdots (11-9)$$

なるマトリクスである。

(11-6)，(11-7)，(11-8)式を整理すれば，

$$j\omega \delta\mathbb{N} = \left(\mathbb{W}^\circ + \frac{d\mathbb{W}}{d\mathbb{亜}} \cdot \delta\mathbb{亜}\right) \cdot \left(\mathbb{N}^\circ + \delta\mathbb{N}\right) + \mathbb{C}(\mathbb{亜}^\circ) + \tilde{\mathbb{C}} \cdot \delta\mathbb{亜}$$

$$= \mathbb{W}^\circ \cdot \mathbb{N}^\circ + \frac{d\mathbb{W}}{d\mathbb{亜}} \cdot \delta\mathbb{亜} \cdot \mathbb{N}^\circ + \mathbb{W}^\circ \cdot \delta\mathbb{N} + \frac{d\mathbb{W}}{d\mathbb{亜}} \cdot \delta\mathbb{亜} \cdot \delta\mathbb{N} + \mathbb{C}(\mathbb{亜}^\circ) + \tilde{\mathbb{C}} \cdot \delta\mathbb{亜} \quad \cdots (11-10)$$

となる。(11-10)式において，交流電圧が零のときは，定常状態におけるつり合いの条件として次の関係式が成立する。

$$\mathbb{W}^\circ \cdot \mathbb{N}^\circ + \mathbb{C}(\mathbb{亜}^\circ) = 0 \quad \cdots (11-11)$$

また，変化分は定常値に対してはかなり小さいと考えているので，変化分の二次の項を零とみるならば，

$$\delta \vec{E} \cdot \delta \mathbb{N} = 0 \qquad \cdots\cdots (11-12)$$

上記（11－11），（11－12）式を（11－10）式に代入すれば，一般の誘電体材料の誘電特性を解析するための基本式として次式が得られる。

$$j\omega \delta \mathbb{N} = \frac{d\mathbb{W}}{d\vec{E}} \cdot \delta \vec{E} \cdot \mathbb{N}^{\circ} + \mathbb{W}^{\circ} \cdot \delta \mathbb{N} + \hat{\mathbb{C}} \cdot \delta \vec{E} \qquad \cdots\cdots (11-13)$$

（11－13）式で，$d\mathbb{W}/d\vec{E}$ は（11－7）式から基本式が定まれば求められることは明らかである。また，$\mathbb{N}^{\circ}$，$\mathbb{W}^{\circ}$，$\hat{\mathbb{C}}$ は初期電荷分布が定まれば算出できる量である。従って，数値解析上問題となるのは $\delta \vec{E}$ のみである。次に，$\delta \vec{E}$ について検討する。

11－4　ポテンシャル関数の小信号応答

（11－13）式を解析するためにはポテンシャル $\vec{E}$ の小信号応答を求めねばならない。ポテンシャル関数 $\vec{E}$ は，ポアソンの式によって定まるのであるから，試料内の空間電荷分布及び外部印加電圧の関数として示され一般に次式で表わされる。

$$\vec{E} = \vec{E}(\mathbb{N}, v) \qquad \cdots\cdots (11-14)$$

従って，$\mathbb{N}^{\circ}$，v° を基準値とする小信号応答を求めるために，$\mathbb{N} \to \mathbb{N}^{\circ} + \delta \mathbb{N}$，$v \to v^{\circ} + \delta v$ なる変換をして（11－14）式に代入すれば，

$$\vec{E}(\mathbb{N}^{\circ} + \delta \mathbb{N}, v^{\circ} + \delta v)$$

$$= \begin{bmatrix} \phi_1(N_1^{\circ} + \delta N_1, N_2^{\circ} + \delta N_2, \cdots, N_n^{\circ} + \delta N_n, v^{\circ} + \delta v) \\ \phi_2(N_1^{\circ} + \delta N_1, N_2^{\circ} + \delta N_2, \cdots, N_n^{\circ} + \delta N_n, v^{\circ} + \delta v) \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ \phi_n(N_1^{\circ} + \delta N_1, N_2^{\circ} + \delta N_2, \cdots, N_n^{\circ} + \delta N_n, v^{\circ} + \delta v) \end{bmatrix}$$

$$= \vec{E}^{\circ} + \mathbb{K} \cdot \delta \mathbb{N} + \frac{\partial \vec{E}}{\partial v} \delta v \qquad \cdots\cdots (11-15)$$

ただし，

$$\mathbb{K} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \Phi_1}{\partial N_1}, & \frac{\partial \Phi_1}{\partial N_2}, & \cdots, & \frac{\partial \Phi_1}{\partial N_n} \\ \frac{\partial \Phi_2}{\partial N_1}, & \frac{\partial \Phi_2}{\partial N_2}, & \cdots, & \frac{\partial \Phi_2}{\partial N_n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \frac{\partial \Phi_n}{\partial N_1}, & \frac{\partial \Phi_n}{\partial N_2}, & \cdots, & \frac{\partial \Phi_n}{\partial N_n} \end{bmatrix}, \quad \frac{\partial \Phi}{\partial v} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \Phi_1}{\partial v} \\ \frac{\partial \Phi_2}{\partial v} \\ \vdots \\ \frac{\partial \Phi_n}{\partial v} \end{bmatrix}$$

よって，（11－15）式より

$$\delta \Phi = \mathbb{K} \cdot \delta \mathbb{N} + \frac{\partial \Phi}{\partial v} \cdot \delta v \qquad \cdots\cdots (11-16)$$

となることがわかる。

ここで，Φ，$\mathbb{N}$，vの間の関係についての求め方を検討しよう。第12章で詳しく述べるが，一般に空間電荷分布$\mathbb{Q}_s$（$= q\mathbb{N}$）が定められたとき，境界条件を満足するように試料内のポテンシャルを数値解析によって求める方法として，領域計算法（差分法，有限要素法）と境界計算法（電荷重畳法，表面電荷法）がある。そして，例えば電荷重畳法を用いるとすれば以下のようになる。

いま，$\mathbb{P}_t$，$\mathbb{P}_{st}$を境界に対する電位係数，$\mathbb{Q}$，$\mathbb{Q}_s$を影像電荷及び空間電荷，Φ_Bを境界の電位とすれば，

$$\Phi_B = \mathbb{P}_t \mathbb{Q} + \mathbb{P}_{st} \cdot \mathbb{Q}_s \qquad \cdots\cdots (11-17)$$

なる関係式が成立する。この（11－17）式を影像電荷$\mathbb{Q}$について解けば，

$$\mathbb{Q} = \mathbb{P}_t^{-1} (\Phi_B - \mathbb{P}_{st} \cdot \mathbb{Q}_s) \qquad \cdots\cdots (11-18)$$

となるが，（11－18）式で得られる$\mathbb{Q}$と$\mathbb{Q}_s$を用いれば，$\mathbb{P}$，$\mathbb{P}_s$を試料内の与えられた位置に対する電位係数，Φをその位置の電位として次の関係式が導かれる。

$$\begin{aligned} \Phi &= \mathbb{P} \cdot \mathbb{Q} + \mathbb{P}_s \cdot \mathbb{Q}_s \\ &= \mathbb{P} \cdot \mathbb{P}_t^{-1} \Phi_B + (\mathbb{P}_s - \mathbb{P} \cdot \mathbb{P}_t^{-1} \cdot \mathbb{P}_{st}) \cdot \mathbb{Q}_s \end{aligned}$$

・・・・（11－19）

よって（11－19）式から，試料内の電荷分布が与えられたとき各位置のポテンシャルも定められることがわかる。

以上のようにして電荷重畳法を用いれば，$\mathbb{Q}$，$\mathbb{N}$，$\mathbb{V}$の関係が定められるが，他の計算法においても同様である。（第12章参照）

上記，（11－19）式を用いれば，

$$\delta\mathbb{Q} = \mathbb{P}\cdot\mathbb{P}_t^{-1}\cdot\frac{\partial\mathbb{Q}_0}{\partial\mathbb{V}}\cdot\delta\mathbb{V} + g(\mathbb{P}_s - \mathbb{P}\cdot\mathbb{P}_t^{-1}\cdot\mathbb{P}_{st})\cdot\delta\mathbb{N}$$

・・・・（11－20）

なる関係式が得られるが，（11－20）式の$\delta\mathbb{N}$及び$\delta\mathbb{V}$の係数は（11－16）式の$\delta\mathbb{N}$および$\delta\mathbb{V}$の係数に対応している。このことは，（11－16）式の係数が，電荷重畳法などによって定められることを意味している。このことは他の計算法についても同様である。

11－5　一般誘電体材料におけるクラマース・クローニッヒの関係

この節では，一般誘電体材料における空間電荷分極によるクラマース・クローニッヒの関係を導く。

（11－16）式を（11－13）式に代入して式を整理すれば，

$$\left(j\omega\mathbb{I} - \frac{d\mathbb{W}}{d\mathbb{Q}}\cdot\mathbb{k}\cdot\mathbb{N}^\circ - \mathbb{W}^\circ - \tilde{\mathbb{C}}\cdot\mathbb{k}\right)\cdot\frac{\delta\mathbb{N}}{\delta\mathbb{V}} = \left(\frac{d\mathbb{W}}{d\mathbb{Q}}\cdot\frac{\partial\mathbb{Q}}{\partial\mathbb{V}}\cdot\mathbb{N}^\circ + \tilde{\mathbb{C}}\frac{\partial\mathbb{Q}}{\partial\mathbb{V}}\right)\cdots\cdots(11-20)$$

ただし，$\mathbb{I}$はn行n列の単位行列である。

いま，（11－20）式に対して，

$$\frac{\partial\mathbb{N}}{\partial\mathbb{V}} = \mathbb{K}_R + j\mathbb{K}_{IM}\quad,\quad\left(\frac{\partial\mathbb{N}}{\partial\mathbb{V}}\right)^T = \left(\frac{\partial N_1}{\partial\mathbb{V}},\frac{\partial N_2}{\partial\mathbb{V}},\cdots,\frac{\partial N_n}{\partial\mathbb{V}}\right)$$

・・・・・（11－21）

と置き，（11－20）式に代入して整理すれば，

$$j\left(\omega \mathbb{X}_R - \mathbb{M}\cdot\mathbb{X}_{IM}\right) - \mathbb{M}\cdot\mathbb{X}_R - \omega\mathbb{X}_{IM} - \mathbb{A} = 0$$

ただし，

$$\mathbb{M} = \frac{dW}{d\mathbb{E}}\cdot\mathbb{K}\cdot\mathbb{N}^\circ + W^\circ + \tilde{\mathbb{C}}\cdot\mathbb{K}$$

$$\mathbb{A} = \frac{dW}{d\mathbb{E}}\cdot\frac{\partial\mathbb{E}}{\partial v}\cdot\mathbb{N}^\circ + \tilde{\mathbb{C}}\cdot\frac{\partial\mathbb{E}}{\partial v}$$

である。 ・・・・・（11－22）

よって，（11－22）式が成立する条件として，実部と虚部を共に零と置けば，

$$\mathbb{X}_R = \frac{1}{\omega}\mathbb{M}\cdot\mathbb{X}_{IM}\ ,\ \mathbb{X}_{IM} = -\frac{1}{\omega}\mathbb{M}\cdot\mathbb{X}_R - \frac{1}{\omega}\mathbb{A}$$

・・・・・（11－23）

（11－23）式は実数部は虚数部より，逆に虚数部は実数部より求められることを示している。この関係は因果律としてよく知られるクラマース・クローニッヒの関係で，一般誘電体の空間電荷分極という立場で導かれたことは興味深い。

（11－23）式をさらに$\mathbb{X}_R$，$\mathbb{X}_{IM}$について解けば以下のようである。

$$\mathbb{X}_R = \frac{-\mathbb{M}\cdot\mathbb{A}}{\omega^2\mathbb{E} + \mathbb{M}^2}\ ,\ \mathbb{X}_{IM} = \frac{-\omega\mathbb{A}}{\omega^2\mathbb{E} + \mathbb{M}^2}$$

ただし，$\mathbb{E}$は単位行列である。 ・・・・・（11－24）

11－6　空間電荷分極の誘電率

試料内の分極量Pは，分極量を評価するための基準となる初期分布をN°として，

$$P = q\sum_{i=1}^{m} W_i\cdot(N_i - N_i^\circ) \quad \cdots(11-25)$$

で示される。ただし，W_i は区分領域に対する位置ベクトルで第11－2図に示す通りである。

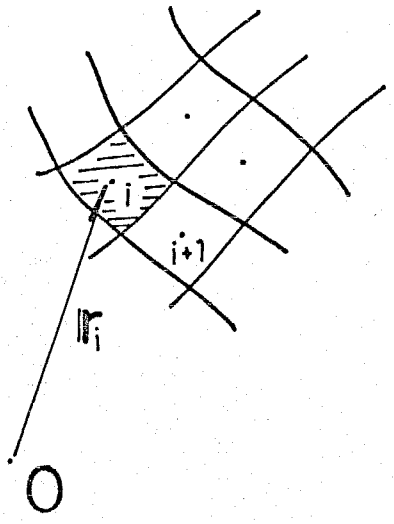
従って，v なる交流電圧が印加された場合，分極量の電圧に対する変化は，

$$\frac{dP}{dv} = \rho \sum_{i=1}^{n} W_i \cdot \frac{\delta N_i}{\delta v} \qquad \cdots\cdots (11-26)$$

で示される。従って，(11－26)式に(11－21)式を代入すれば，

$$\frac{dP}{dv} = \rho\, W \cdot (\chi_R + j\chi_{IM}) \qquad \cdots\cdots (11-27)$$

ただし，$W = (r_1, r_2, \cdots, r_n)$ である。



第11－2図　領域 i に対する位置ベクトル

ここで，(11－27)式において，左辺 dP/dv は，ε^* さ複素誘電率として，

$$\frac{dP}{dE} = \varepsilon^* = \varepsilon' - j\varepsilon'' \qquad \cdots\cdots (11-28)$$

ただし，E は試料に対する平均電界で，$v = \beta E$ なる関係で結ばれているとする。ここで β は試料の幾何学的な形状によって定まる量である。たとえば一次元で厚さ d の試料を考えれば $\beta = d$ となる。

よって，(11－27)，(11－28)式を比較すれば，

$$\left.\begin{aligned} \varepsilon' &= \beta\rho\, W \cdot \chi_R \\ \varepsilon'' &= -\beta\rho\, W \cdot \chi_{IM} \end{aligned}\right\} \qquad \cdots\cdots (11-29)$$

となる。このようにして ε'，ε'' を求めることができたが，上記の誘電率の計算においては，一次元空間電荷分極の誘電分散を計算したときと同様に，空間電荷分極による誘電率のみを試料の誘電率と考えている。以上より，(11－29)式を用いて計算を行なえば，周波数特性 $\varepsilon'(f)$，$\varepsilon''(f)$ などを算

出できることが明らかとなった。この特性は，デバイスにおいては素子の周波数応答と関係する重要な量である。また，（11－29）式によって種々の誘電体材料の損失を空間電荷の立場から評価できることも明らかであろう。

11－7．　まとめ

本章では，一般誘電体材料に対する小信号解析を行ない，誘電率ε′と誘電損率ε″の間によく知られるクラマース・クローニッヒの関係が成立することを示した。実際にこの計算を行なうためには，ポアソンの式を与えられた境界条件のもとで解く必要があるが，それには電荷重畳法などの数値計算法が使用できることも示した。そして，空間電荷分極による誘電率ε′および誘電損率ε″が求まると，実用機器に対する空間電荷分極の効果も含めた損失の評価が可能となる。そして，ε′，ε″を周波数を変えて計算して特性を算出すれば，それが誘電体材料の周波数特性となる。この特性はデバイスにとっては重要な量であるが，本章で述べた数値解析法はこれに適用できるであろう。

第12章　二次元ポアソン場の数値解析に関する研究

12.1 まえがき[84]~[89]

最近，高電圧工学の分野では，電気機器の絶縁設計などに対する要求から電算機を用いた数値計算による電界計算が行なわれ，空間電荷を含まないラプラスの場については，その計算法が確立するに至っている。[84] 一方，実際の電気機器においては，例えばプラスチックケーブルにはトリーの問題があり，その場合，空間電荷による電界の変歪を考慮しなければ現象を把握することができない。[86] このような観点から空間電荷を考慮した電界計算は実際の絶縁設計において重要であると考えられるが，ラプラスの場の計算と異なり，ポアソンの式だけでなく電流連続の式を同時に考慮しなければならないこと，境界条件が明確でない場合が多いことなどの理由により，その計算を実行することは厄介であまり行なわれていない。加えて，電気機器やデバイスの問題を扱かう場合には，その形状を考えねばならず，二次元，三次元の場合を取扱う必要がある。[20] 従って，現状ではこの問題に対して数値解析の方向が進展しているが，主として定常問題の取扱いであり，またかなり複雑でもある。そして，この場合の電界計算としては，空間電荷分布を仮定してポアソンの式だけを用いた解析や，[87] 定常状態のイオン流場の解析に見られるように，イオン流が電界を変えないとするとかイオン流が電界の方向を変えないとするなどの適当な仮定を置くことにより計算が進められている。[88] また，空間電荷を含むこの種の問題を一般的に扱かうためには有限要素法や差分法によらなければならないが，これらの方法によって解析を行なった報告もみられている。[89]

ところで，電気機器中の絶縁体内部の電荷の挙動は，空間電荷電界によるドリフトと電荷の拡散からなる電流により記述される式を用いて解析するのが一般的であるが，今迄にくり返して述べてきたように，これらの問題は解析的に扱かうことはできないが，ホッピング数値解析法を用いればその扱いは容易である。

本章では，このような立場から第2章で述べたホッピング数値計算法の二次元空間電荷電界の数値解析を実際に試みる。ただし，一次元の場合はその目的は主として物性的な研究を対象としていたが，二次元の場合には電界計算自体も意味を持ってくる。そこで，本章での最初の部分の数値解析は，ホッピング数値計算法の有効性を示すためにも，実例としては正方形状の試料を取り上げている。さらに，任意の形状の絶縁体試料について電界計算を行なってゆくためにはホッピング数値計算法による取扱いを一般化しておくことが必要であると考えられるが，本章ではこのような立場からホッピング数値計算法に対する等価回路モデルを考えた解析法も示す。そして，この回路モデルを用いて凹型試料についての電界計算も試みる。ただし，ここでの電界計算はいずれも試料内にはイオン電荷があるとして試料に対する電荷の出入りのない問題について扱かったが，勿論，試料に電荷注入のある場合にも容易に適用されるものである。

12-2 二次元ホッピング数値計算法の基本方程式と境界条件

第2章で詳しく述べたように，ホッピング数値計算法により記述される基本方程式は，座標系や領域の分割の仕方によって変化しない。そして，二次元の場合には，一つの領域は四つの領域に隣接するとして次式で示される。（第12-1図参照）

$$
\begin{aligned}
dN_{i,j}/dt = {} & \omega_{(i-1,j),(i,j)} N_{i-1,j} - \omega_{(i,j),(i-1,j)} N_{i,j} \\
& + \omega_{(i+1,j),(i,j)} N_{i+1,j} - \omega_{(i,j),(i+1,j)} N_{i,j} \\
& + \omega_{(i,j+1),(i,j)} N_{i,j+1} - \omega_{(i,j),(i,j+1)} N_{i,j} \\
& + \omega_{(i,j-1),(i,j)} N_{i,j-1} - \omega_{(i,j),(i,j-1)} N_{i,j}
\end{aligned}
$$

・・・・・(12-1)

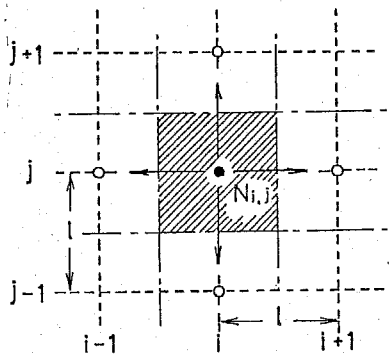
そして，(12-1)式が解析のための基本式となるが，その場合には以下の条件を仮定している。

(i)試料内には単一の過剰な可動イオンが存在し，全イオン量は $q_0 N_t$ である。

(ii)電極面は可動イオンに対してブロッキングである。つまり，試料から外部へのイオンの移動はない。

(iii)可動イオンの遷移は隣接する領域に対してのみとする。

(iv)試料内，従って各領域内でのイオンの発生と消滅はない。



第12-1図
二次元ホッピングモデル
(電荷 $N_{i,j}$ の挙動)

以下の条件のもとで，定常状態における電荷分布を求めるためには，(12-1)式の左辺の時間項を零とおき，(i)～(iv)で記述される境界条件を代入して得られる非線形連立方程式を N_j について解けばよい。ただし，(12-1)式中の遷移を表わす ω はポテンシャルの関数であり，その場合，空間電荷の影響を考慮しているので，その結果は電荷数の関数となる。従って，ポテンシャルと電荷の関係を求めておくことが必要となる。

12-3 電荷数とポテンシャルの関係

ポテンシャルと電荷数の関係を求めることは，試料内の電荷分布 $\rho(x, y)$ が与えられたとき，二次元のポアソンの式

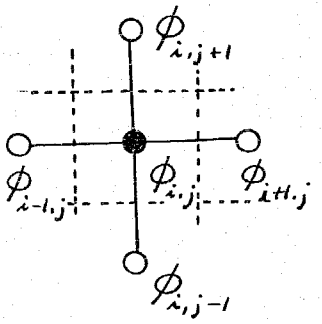
$$\nabla^2 \phi = -\frac{\rho}{\varepsilon} \qquad \cdots\cdots (12-2)$$

を，境界条件を満足するように解くことである。(12-2)式で示される空間電荷場を一般的に扱うためには数値計算によらねばならないが，そのため

		領域計算法		境界計算法	
		差分法	有限要素法	電荷重畳法	表面電荷法
計算上の特徴	計算原理	全体場を格子点に分割し，各格子点の電位をテーラー展開し，差分方程式になおしてラプラスの方程式を解く	全体場を有限個の要素に分割し，エネルギー最小原理を用いて等価的にラプラスの方程式を解く	電極内あるいは誘電体内に置いた仮想電荷により誘起される電位を重畳し境界条件と合せて解く	電極あるいは誘電体境界面上に置いた表面電荷により誘起される電位を重畳し，境界条件下で解く
	未知数	全体場の格子点電位	全体場の要素の各節点電位	仮想電荷量	表面電荷密度
	未知数の数	数 100～数 10,000		数 10～数 100	
	係数マトリックス	ほとんどの項が0		非対称でほとんどの項が0でない	
	解く方程式*	$(P)\cdot(\phi)=(B)$		$(P)\cdot(Q)=(\phi)$	
	方程式の解法	直接法，元数が多いときは反復法		直接法	
	電界強度の計算	電位を数値微分	電位近似関数の微分	電荷量および電界係数より解析的に	電位の数値微分か電荷より計算
	プログラミング	容易	複雑	容易	電荷上の特異点を避ける必要あり複雑
	計算精度	低い	低い	高い	普通
	計算時間	格子にほぼ比例	節点数にほぼ比例	(電荷数)$^{2-3}$にほぼ比例	(電荷数)$^{1.5-2}$にほぼ比例
	汎用化	自動入力必要	自動入力必要	電荷配置に若干の経験必要	容易
	等電位面	すでに全体場を計算しているので容易		1媒質場容易，2媒質場困難	容易
用いる場の特徴	部分場および開いた空間	不向（仮想境界により処理できる）	不向（同左）	適している（電位が無限遠で自動的に0となる）	適している（同左）
	多媒質場	適用できるが形状によっては不向	適している	2媒質まで	適している
	境界形状の複雑な場	不向（境界処理が面倒）	適している	電荷数が計算機で制限されるので不向	適している
	薄い電荷場あるいは薄い誘電体場	適している	適している	内部に仮想電荷を置く必要があり不向	適している
	空間電荷場	適している	適している	不向	不向
	表面抵抗のある場や直流・交流電界	適している	適している	場合によっては解ける	不向
	非均質あるいは非線形場	不向	適している	不向	不向
	三次元計算	可能であるが複雑	可能であるが複雑	適している	困難
その他		徐々に有限要素法に移行している	最も汎用性に富んでいる	最も手軽で精度が良い	電荷重畳法と併用すると良い

*: (P)：係数マトリックス，(ϕ)：電位ベクトル，(B)：定数ベクトル
(Q)：電荷量ベクトル

第12－1表　電界計算法の一般的特徴[84]



第12－2図　五点差分近似

の計算法としては大きく分けて領域計算法と境界計算法とがある。そして，これらは計算法としてはほぼ完成しており，その特徴が第12－1表のように整理されている。本章でも，これらの計算法を用いて解析を試みているので，まず各計算法について簡単に整理して述べる。

（12－3－1）　差分法[89),(90)]

この方法は，最も古くから知られている方法であり，空間を多角形に分割して既知の格子点の電位から差分方程式を解くことにより求める。計算においては三角形格子，四角形格子そして六角形格子などがよく用いられる。簡単のため第12－2図に示すように，正方形状に領域を区切り，領域内中心部に格子点を定めて，任意の格子点のポテンシャルを隣接する四つの格子点より五点差分近似式として知られている公式により求める場合を考える。この近似式は，（12－2）式に対して格子点を結ぶ間の電位を直線近似することを意味している。

すなわち，第12－2図（i，j）点では，

$$\phi_{i+1,j} + \phi_{i,j+1} + \phi_{i-1,j} + \phi_{i,j-1} - 4\phi_{i,j}$$

$$= -\frac{\bar{\rho}_{i,j}}{\varepsilon}\,\delta x \cdot \delta y = -\frac{qN_{i,j}}{\varepsilon} \quad \cdots\cdots (12-3)$$

なる差分式が得られる。ただし，（12－3）式では領域内での電荷密度は，$\bar{\rho}_{i,j}$で一定であるとしている。また，δx，δyは格子点間の距離である。同様のことを各格子点に対して行なえば，（12－3）式より次のようにマトリクス表示される。

$$[k]\cdot[\Phi] = [N] \quad \cdots\cdots (12-4)$$

ただし，$[\Phi]$，$[N]$は，$[\Phi]^T = (\phi_{11}, \phi_{12}, \cdots)$，$[N]^T = (-qN_{11}/\varepsilon, -qN_{12}/\varepsilon, \cdots)$なる各格子点における電位及び各領域内の電荷を成分とするマトリクス，$[k]$は（12－3）式のϕの係数より定まるマトリクスである。そして，この（12－4）式に境界条件を代入すれば，この式は次のように変形される。

$$[\tilde{k}]\cdot[\Phi] = [\tilde{N}] \quad \cdots\cdots (12-5)$$

上式を用いれば，$[\Phi] = [\tilde{k}]^{-1}\cdot[\tilde{N}]$と$[\Phi]$について解かれるので，任意の電荷分布が与えられたとき，境界条件を満足するようにポテンシャルが定められる。以上は五点差分公式による例であるが，他の近似式の場合にも変わりはない。

（12－3－2）　有限要素法[84][91]

有限要素法は与えられた全体の場を有限個の要素に分割し，全体の場の静電エネルギーを最小にするように各節点の電位を与えるものである。そして，（12－2）式で与えられるポアソンの方程式を解くことは，この式に対応する汎関数

$$\alpha(\phi)=\iint_R\left\{\frac{1}{2}\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)^2+\frac{1}{2}\left(\frac{\partial\phi}{\partial y}\right)^2-\frac{\rho}{\varepsilon}\phi\right\}dxdy \quad \cdots\cdots(12-6)$$

を最小とするような関数ϕを，領域Rの境界Γ上で，境界条件$\phi_\Gamma(x,y)=\phi_0$（ϕ_0は指定された値）を満足する関数の中から定めることである。（12-6）式から実際にどのような手順で解析するかは付録8で述べたが，結局次の連立方程式に境界条件を代入して解く問題に帰着される。

$$[K]\cdot[\Phi]=[F] \quad \cdots\cdots(12-7)$$

ただし，$[K]$は要素についてのマトリクスkを重ね合わせてでき上った全体の系に対するマトリクスで，$[F]$は電荷分布に関係した行列である。（12-7）式より，任意の電荷分布が定められたとき，試料内のポテンシャルが求められる。

<12-3-3> 表面電荷法[92),(93)]

表面電荷法は，ラプラスの方程式を満足する静電場を，境界面上に有限個の仮想電荷を置き境界条件が満足されるようにその大きさを定めてから，この電荷の作る電場より数値計算して解析する方法である。そして，この方法は空間電荷場に対しても適用できるものであり，本章の後に述べる計算例ではこれが用いられている。以下に空間電荷場に対する表面電荷法の扱いについて述べる。二次元の場合には，電荷分布$\rho(x,y)$が与えられるとすると試料内のポテンシャル$\phi(x,y)$は，付録9より次式で示すことができる。

$$\phi=\oint_C G\sigma\,dC+\iint_R G\rho\,dx'dy' \quad \cdots\cdots(12-8)$$

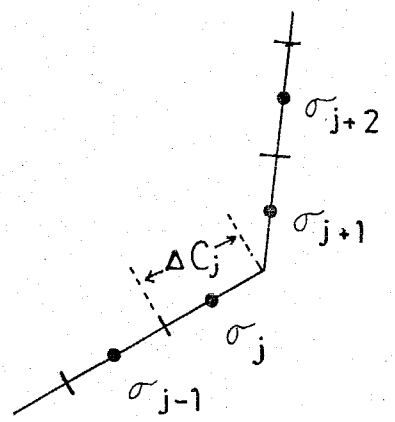
ただし，Gはグリーン関数で（付-3）式で与えられ，(x',y')は電荷の置かれた座標，(x,y)は観測点を表わしている。また，第一項が境界面上に仮定した電荷分布σ，第二項が試料内の電荷ρによるポテンシャルを示す。そして，Cが境界，Rが境界で囲まれた試料内部を示す。従って，（12-8）

式を用いれば静電場のポテンシャルを計算できるが，そのためには境界条件を満足するようにσを定めなければならない。境界条件は種々考えられるが，すべて次式で示される。

$$\alpha\phi + \beta\frac{\partial\phi}{\partial n} = \gamma \qquad \cdots\cdots(12-9)$$

ただし，nは境界面に対する法線方向を示し，たとえば境界面上の電位が与えられている場合には，$\alpha=1$，$\beta=0$（Dirichletの条件），電界が与えられる場合は，$\alpha=0$，$\beta=1$（Neumannの条件）となる。

実際に数値解析するためには，第12-3図のように境界面上を有限の線分で分割し，その区間で電荷密度は一定とする。また試料内も有限の大きさの領域で分割し，その領域内で電荷密度は一定であると仮定する。この条件のもとで，（12-8）式を書き直せば，境界面をm分割，試料内をn領域に分割するとして，試料内（x，y）の位置をiとすれば，その電位ϕ_iは次のようである。



第12-3図　表面電荷法における境界面上の扱かい

$$\phi_i = \sum_{j=1}^{m} g_{i,j}\sigma_j + \sum_{j=1}^{n} f_{i,j}\rho_j \qquad \cdots\cdots(12-10)$$

ただし，$g_{i,j}$，$f_{i,j}$はそれぞれjの位置(x', y')における単位電荷によるiの位置の電位であり，次のようになる。

$$g_{i,j} = \frac{1}{2\pi\varepsilon}\int_{-\frac{\Delta C_j}{2}}^{\frac{\Delta C_j}{2}} \ln\frac{k}{\sqrt{(x-x')^2+(y-y')^2}}\,dC \qquad \cdots\cdots(12-11)$$

ただし，ΔC_jは(x', y')を中心とする境界線上で分割した場合の有限の長さである（第12-3図参照）。また，

$$f_{i,j} = \frac{1}{2\pi\varepsilon}\iint_{\Delta R_j} \ln \frac{k}{\sqrt{(x-x')^2+(y-y')^2}}\,dx'dy' \quad \cdots\cdots (12-11)$$

ただし，ΔR_j は (x', y') を含む試料内の有限の領域である。

ここで，(12-10)式をマトリクス表示すれば，

$$[\Phi] = [F_1][\sigma] + [F_2][\rho] \quad \cdots\cdots (12-13)$$

ただし，$[\Phi]^T = (\Phi_1, \Phi_2, \cdots, \Phi_n)$，$[\sigma]^T = (\sigma_1, \sigma_2, \cdots, \sigma_m)$，$[\rho]^T = (\rho_1, \rho_2, \cdots, \rho_n)$ なるマトリクスで，$[F_1]$，$[F_2]$ はその成分がそれぞれ，$[F_1]_{i,j} = g_{i,j}$，$[F_2]_{i,j} = f_{i,j}$ であるマトリクスである。(12-10)式を(12-9)式に代入すれば，

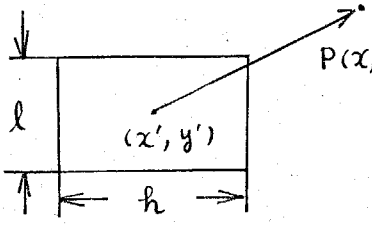
$$[D_1][\sigma] + [D_2][\rho] = [B] \quad \cdots\cdots (12-14)$$

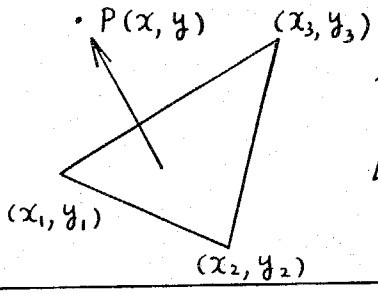
なる関係式が得られる。ただし，$[D_1]$，$[D_2]$ の成分は，$[D_1]_{i,j} = \alpha g_{i,j} + \beta \partial g_{i,j}/\partial n$，$[D_2]_{i,j} = \alpha f_{i,j} + \beta \partial f_{i,j}/\partial n$ である。また，$[B]$ は $[B]^T = (\gamma_1, \gamma_2, \cdots \gamma_m)$ なる成分を持つマトリクスである。従って，(12-13)，(12-14)式より試料内の電位は，

$$[\Phi] = [F_1][D_1]^{-1}[B] + \left\{[F_2] - [F_1][D_1]^{-1}[D_2]\right\}[\rho] \quad \cdots\cdots (12-15)$$

上式が任意の電荷分布が与えられたとき，境界条件を満足するように試料内の電位を定める関係式である。以上より，この方法の有効性を述べると次のようになる。まず第1に，(12-15)式からわかるように，$[\Phi]$ の計算で必要になる逆マトリクスの計算は $[D_1]^{-1}$，つまりラプラス場を計算するための逆マトリクスのみで，表面電荷法においてはその計算の性格上，このマトリクスの次元は小さくてよい。従って，この点については差分法や有限要素法に比較すれば扱かい易い。第二に，電荷重畳法と比較すれば，表面電荷法は境界面上に電荷を置く方法であるために仮想電荷の配置に対する問題を考えなくてよい。第三に，ホッピング数値計算法で電界計算にとどまらず，第11章で述べ

第12-2表 代表的な領域に対する $f_{i,j}$ の計算

番号	項目	内容
1	分割の方法	 長方形状の領域による分割 $a = x' - x - \frac{h}{2}$, $c = y' - y - \frac{l}{2}$ $b = x' - x + \frac{h}{2}$, $d = y' - y + \frac{l}{2}$ $\Delta = hl$
	$f_{i,j}$	$f_{i,j} = \frac{1}{2\pi\varepsilon}(\ln k + 1.5)$ $+ \frac{1}{4\pi\varepsilon\Delta}\left[ad\ln(a^2+d^2) - bd\ln(b^2+d^2)\right.$ $+bc\ln(b^2+c^2) - ac\ln(a^2+c^2)$ $+a^2\{\tan^{-1}(d/a) - \tan^{-1}(c/a)\}$ $-b^2\{\tan^{-1}(d/b) - \tan^{-1}(c/b)\}$ $+c^2\{\tan^{-1}(b/c) - \tan^{-1}(a/c)\}$ $\left.-d^2\{\tan^{-1}(b/d) - \tan^{-1}(a/d)\}\right]$ k：任意定数
	$-\frac{\partial f_{i,j}}{\partial x}$	$-\frac{\partial f_{i,j}}{\partial x} = \frac{1}{2\pi\varepsilon\Delta}\left[\frac{d}{2}\ln\frac{a^2+d^2}{b^2+d^2} + \frac{c}{2}\ln\frac{b^2+c^2}{a^2+c^2}\right.$ $-b\left(\tan^{-1}\frac{d}{b} - \tan^{-1}\frac{c}{b}\right)$ $\left.+a\left(\tan^{-1}\frac{d}{a} - \tan^{-1}\frac{c}{a}\right)\right]$
	$\frac{\partial f_{i,j}}{\partial y}$	$-\frac{\partial f_{i,j}}{\partial y} = \frac{1}{2\pi\varepsilon\Delta}\left[\frac{b}{2}\ln\frac{b^2+c^2}{b^2+d^2} + \frac{a}{2}\ln\frac{a^2+d^2}{a^2+c^2}\right.$ $+c\left(\tan^{-1}\frac{b}{c} - \tan^{-1}\frac{a}{c}\right)$ $\left.-d\left(\tan^{-1}\frac{b}{d} - \tan^{-1}\frac{a}{d}\right)\right]$

	分割の方法	 任意三角形状の領域による分割 Δ:三角形の面積
2	$f_{i,j}$	$f_{i,j} = \frac{1}{2\pi\varepsilon}\left[\ln k + 0.5\right]$ $-\frac{1}{4\pi\varepsilon\Delta}\sum_{i_1,i_2,i_3}\Big[(y_{i_1}-y_{i_3})m_{i_1}g_{i_1}+\frac{(y_{i_3}-y_{i_1})}{2}(a_{i_1}+a_{i_3}+2m_{i_1}g_{i_1})\cdot$ $\cdot\ln(m_{i_1}^2+1)$ $+g_{i_1}(x_{i_3}-x_{i_1})\{\ln(m_{i_1}^2+1)-1\}$ $+g_{i_1}(a_{i_3}+m_{i_1}g_{i_1})\ln\{(m_{i_1}g_{i_1}+a_{i_3})^2+g_{i_1}^2\}$ $-g_{i_1}(a_{i_1}+m_{i_1}g_{i_1})\ln\{(m_{i_1}g_{i_1}+a_{i_1})^2+g_{i_1}^2\}$ $+2g_{i_1}^2\{\tan^{-1}(\frac{1}{g_{i_1}}(a_{i_3}+m_{i_1}g_{i_1}))-\tan^{-1}(\frac{1}{g_{i_1}}(a_{i_1}+m_{i_1}g_{i_1}))\}$ $+\frac{m_{i_1}}{2}\{(a_{i_3}+m_{i_1}g_{i_1})^2+g_{i_1}^2\}\ln\{(a_{i_3}+m_{i_1}g_{i_1})^2+g_{i_1}^2\}$ $-\frac{m_{i_1}}{2}\{(a_{i_1}+m_{i_1}g_{i_1})^2+g_{i_1}^2\}\ln\{(a_{i_1}+m_{i_1}g_{i_1})^2+g_{i_1}^2\}$ $+\frac{m_{i_1}^2-1}{(m_{i_1}^2+1)^2}l_{i_1}^2\left(\tan^{-1}\frac{y-y_{i_1}}{x-x_{i_1}}-\tan^{-1}\frac{y-y_{i_3}}{x-x_{i_3}}\right)$ $-\frac{m_{i_1}}{(m_{i_1}^2+1)^2}l_{i_1}^2\ln\frac{(x-x_{i_3})^2+(y-y_{i_3})^2}{(x-x_{i_1})^2+(y-y_{i_1})^2}\Big]$ ただし $\sum_{i_1,i_2,i_3}$ は (i_1,i_2,i_3) について $(1,2,3)$, $(2,3,1)$, $(3,1,2)$ の組の和である。 また, $m_{i_1}=(y_{i_1}-y_{i_3})/(x_{i_1}-x_{i_3})$, $n_{i_1}=(y_{i_3}x_{i_1}-y_{i_1}x_{i_3})/(x_{i_1}-x_{i_3})$ $g_{i_1}=l_{i_1}/(m_{i_1}^2+1)$, $l_{i_1}=m_{i_1}x+n_{i_1}-y$ $a_{i_1}=x_{i_1}-x$

たように分散現象を多次元で扱かうためには，ポテンシャルを電荷の関数として求めておくことが必要であると考えられるが，表面電荷法では（1ス－15）式をそのまま用いることができる。

以上のように表面電荷法は，空間電荷場の解析に有効であると考えられるが，問題は（1ス－12）式の$f_{i,j}$及び$\partial f_{i,j}/\partial n$の計算にある。これらの代表的な領域に対する計算結果を第1ス－2表に示した。従来，この種の計算に時間のかかること及び各領域に対する電荷の効果をすべて加えなければならないことが，空間電荷場の計算に対して表面電荷法が不向である理由とされている。しかし，上述したように分散なども含め空間電荷特性を総合的に扱かうことができるという利点も有しているので，本章ではこの方法の利用を試みた。

尚，第1ス－2表の結果は，電荷重畳法においても同様に用いられる。また，$g_{i,j}$および$\partial g_{i,j}/\partial n$の計算は，（1ス－11）式で示されるように線積分であり，しかもラプラス場の解析でも使用されており，Harrington氏の計算法に従えば問題ない。

<1ス－3－4> 電荷重畳法[94],[95]

電荷重畳法はSteinbigler氏により始められた計算法で，ラプラスの場を満たす解を重ね合わせることにより全体の場を満足する解を得る方法である。[94] ラプラスの場においては以下のようにして行なわれる。まず，境界面上に輪郭点と呼ぶ境界の形状を与える点をとる。次に，電極または絶縁体内に仮想電荷を配置し，輪郭点と仮想電荷の作る電位係数マトリクスを〔P〕，仮想電荷を〔Q〕，輪郭点の電位を〔ϕ〕として，

$$[P]\cdot[Q]=[\phi] \quad \cdots\cdots(1ス-16)$$

なる方程式を解いて仮想電荷電荷量〔Q〕を求め，この〔Q〕と電位係数の関係などより電位を求めるものである。

Singer氏は，さらに空間電荷のある場合について以下のような手法を提案した。[95] 〔P〕，〔P_s〕を輪郭点と電荷の作る電位係数，〔Q〕，〔Q_s〕を電荷，〔ϕ_0〕を境界の電位とする。ただし，sは空間電荷によるものであ

ることを示す。このようにすれば,

$$[P]\cdot[Q]+[P_s]\cdot[Q_s]=[\overline{\phi}_B]\quad\cdots\cdots(12-17)$$

なる関係式が成立する。そこで,(12-17)式の$[Q]$を

$$[Q]=[P]^{-1}([\overline{\phi}_B]-[P_s]\cdot[Q_s])\quad\cdots\cdots(12-18)$$

として求めておく。このことは任意の電位分布$[Q_s]$が定められると,(12-18)式より境界条件が満足されるように仮想電荷$[Q]$を求められることを意味している。従って,試料内の任意の点の電位は,この$[Q]$と$[Q_s]$より,その点に対する電位係数を求めて計算できることになる。尚,この電位係数の計算では,二次元においては第12-2表の$f_{i,j}$の値を用いることができる。

12-4 解析方法

以上で,ホッピング数値計算法による拡散と空間電荷電界によるドリフトから定まる二次元空間電荷電界や電荷分布を求めるための準備ができ上がった。そこで,実際に解析するための手順を以下に整理して示す。

(i) 試料内を領域に分割し,その領域に関する電荷の運動方程式(12-1)式を作成する。このときに12.2節(i)~(iv)項で示した境界条件を代入する。

(ii) 前節で述べた差分法や有限要素法などによりポテンシャルと電荷の関係を求める。(差分法で言えば,(12-5)式を求めることにあたる。)

(iii) 定常状態では,(i)で求めた関係式の時間項を零と置いて連立方程式を作成する。

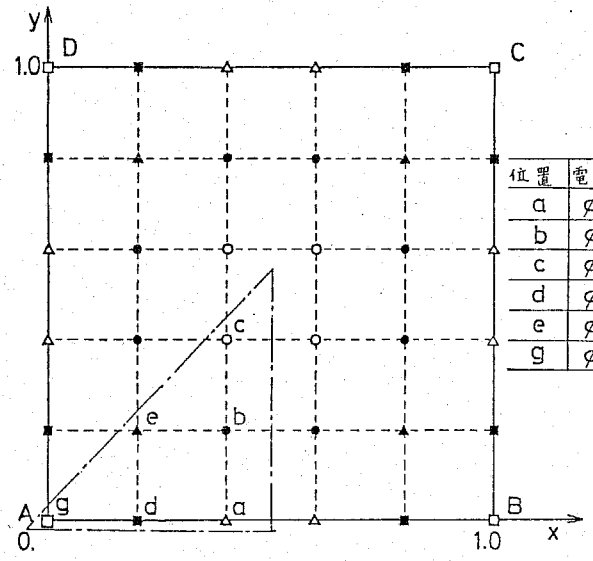
(iv) (iii)で得られた連立方程式を(ii)の関係式のもとで解く。ただし,この場合には方程式は非線型であるので,例えばニュートン法などが用いられる。

以上(i)~(iv)の手順で電荷分布が求めることができる。そして,この

電荷分布を用いれば，例えば差分法で計算する場合には（1z－5）式よりその電位分布を求めることができる。次節では，上記の手順で実際に数値解析を行なった例を示す。

1z－5　数値解析例

ここでは第1z－4図に示すように，A，B，C，Dで囲まれる正方形状試料で，その周囲の電位が零である具体的な場合を考える。この試料の大きさをx方向，y方向についての長さで規格化し，それぞれ1として図のように5等分する。この場合には格子点は36個あるから，この格子点をポテンシャル井戸に考えれば，（1z－1）式の基本式は36できることになる。しかし，形状の対称性があるので図の一点鎖線で囲まれた部分についてだけ考えればよい。そこで，この内部に含まれる格子点をa，b，c，d，e，gで示すことにする。なお，図には形状からみて電荷密度が等しくなる点を，それぞれ△，●，○，■，▲，□で示してある。このa～gの各点で，（1z－1）式の基本式を作り，時間項を零とおくと，d点とg点の電荷数N_dとN_gが等しいことは容易に導ける。そして，試料内の全電荷数がN_tとなる関係から，一つの式を置き換えると次のように5式からなる連立方程式が作成される。



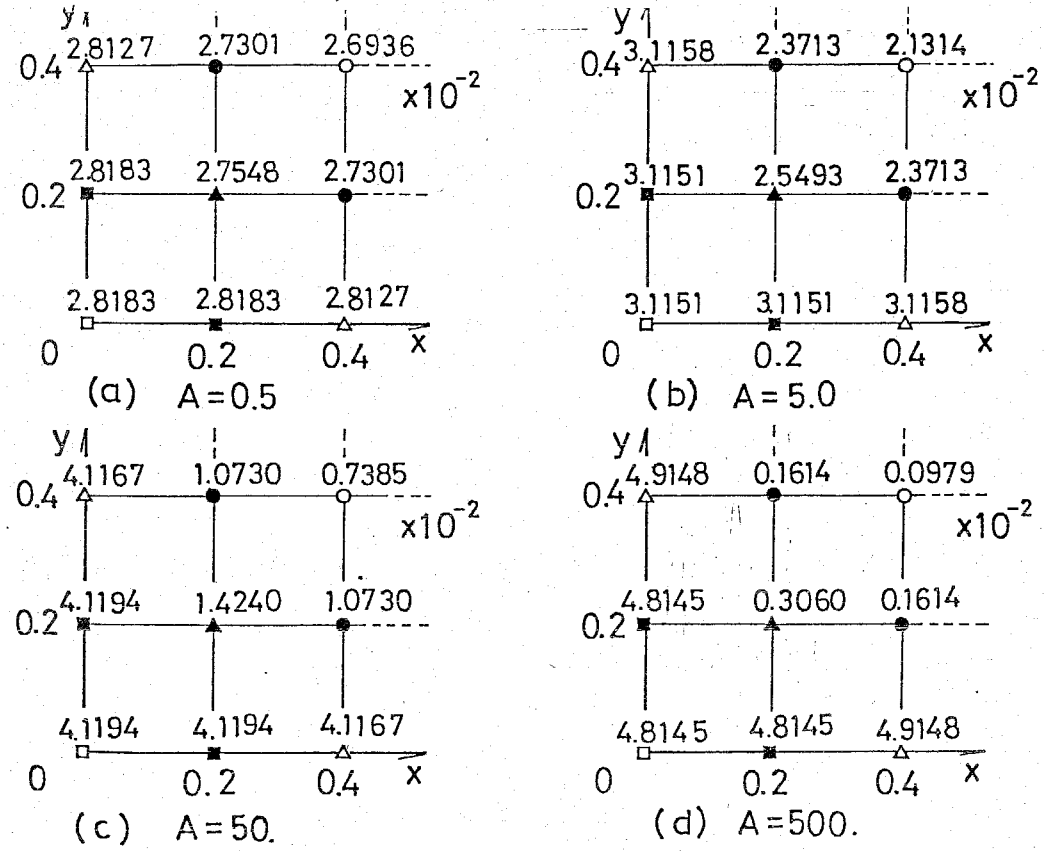
位置	電位	荷電粒子数
a	$\phi_a=0$	N_a
b	ϕ_b	N_b
c	ϕ_c	N_c
d	$\phi_d=0$	N_d
e	ϕ_e	N_e
g	$\phi_g=0$	N_g

第1z－4図　計算に用いた試料の形状，試料内の荷電粒子の位置及び電位

$$\begin{bmatrix} -(\omega_{a,b}+1), & \omega_{b,a}, & 0, & 1, & 0 \\ -1, & -\omega_{b,e}, & 0, & 1, & \omega_{e,b} \\ 0, & \omega_{b,c}, & -\omega_{c,b}, & 0, & 0 \\ 1, & 0, & -1, & -\omega_{d,c}, & \omega_{c,d} \\ 2, & 2, & 1, & 3, & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} N_a \\ N_b \\ N_c \\ N_d \\ N_e \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ N_t/4 \end{bmatrix} \quad \cdots\cdots (12-19)$$

ここで，ωで示される係数は前節でも述べたように電荷の関数である。ここではこの計算に<12-3-1>節で述べた差分法を，(12-19)式の解法においてはニュートン法が用いられた。その場合，初期電荷分布を設定する必要があるが，本数値計算では均一分布すなわち$N_a = N_b = N_c = N_d = N_e = N_t / 36$なる値を用いた。ただし，計算においては格子点に電荷がすべてあるとしている。

以下に計算例を示すが，いずれも$A = qN_t / 2\varepsilon kT$をパラメータとして



(a) A=0.5

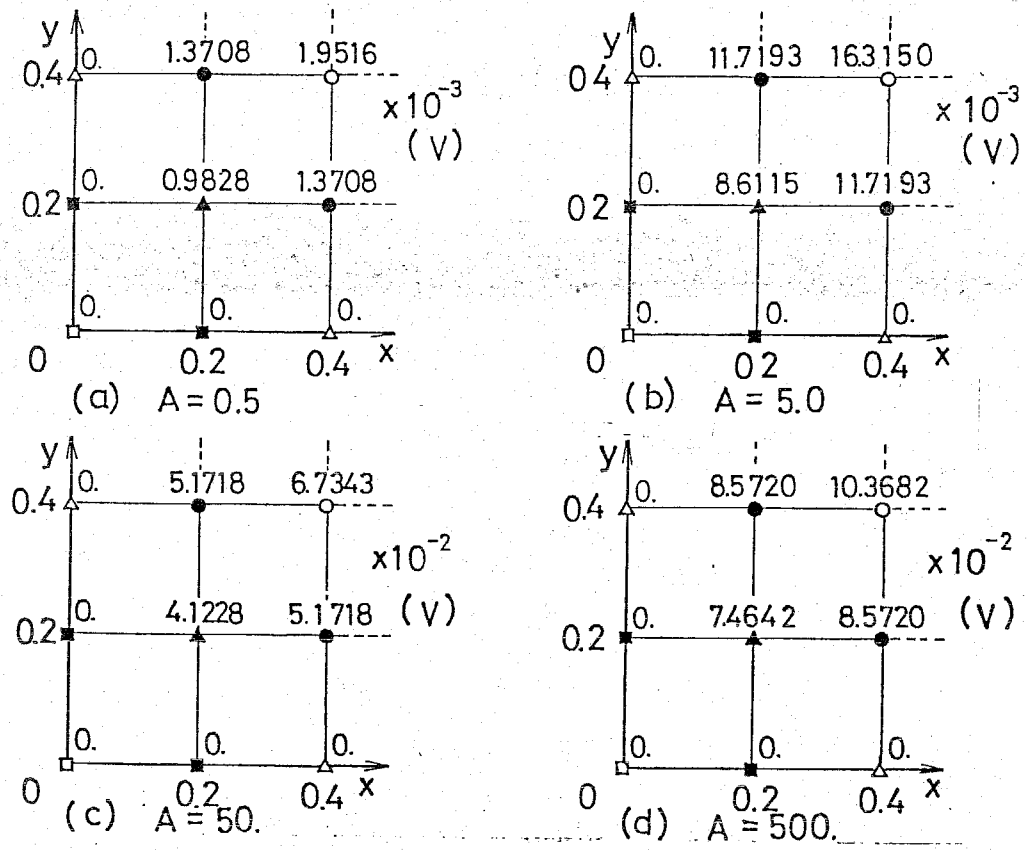
(b) A=5.0

(c) A=50.

(d) A=500.

第12-5図　試料内電荷分布の計算例

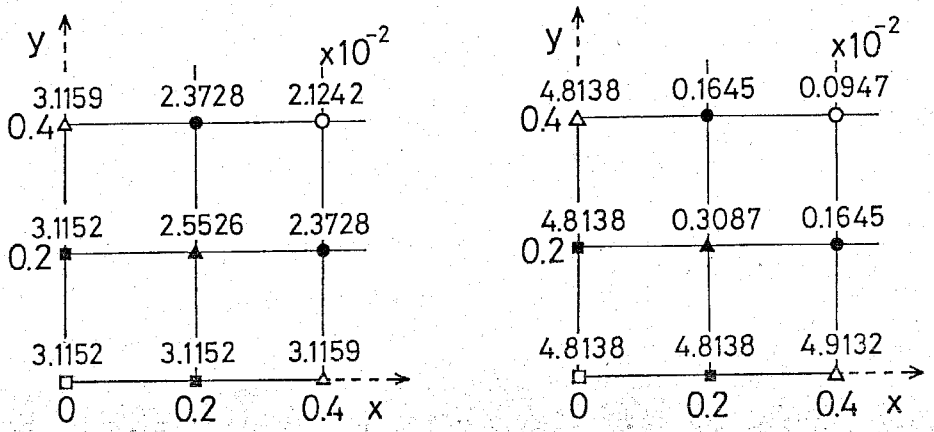
用いている。第12-5図は，T＝500kとしてAを変えた場合の電荷分布の計算例で，(a)はA＝0.5，(b)はA＝5.0，(c)はA＝50.0，(d)はA＝500.0とした場合である。同図よりAの値が大きくなるに従って，つまり試料内に含まれる電荷量の増加に伴なって電荷分布は試料壁面に寄っていくことがわかる。なお，図中の電荷量は全体の量を1で規格化して示した値であり，各点は全体に対する相対的な値である。第12-6図は，第12-5図の各場合についての電位計算を行なったものである。この計算は電荷分布を求めた後に，(12-5)式を用いて行なったものである。この場合も当然ではあるが，電荷量が増加(Aの値が増加)するに従って試料内の電位は増加していることがわかる。



第12-6図　試料内の電位分布の計算例(T＝500k)

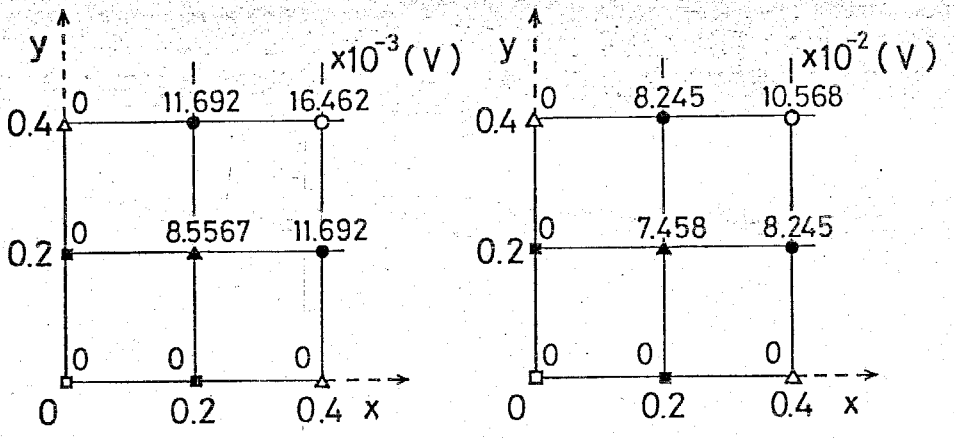
なお，ポテンシャルと電荷の関係を求めるのに第12-4図中a，b，dで囲まれるような直角三角形を要素とする有限要素法を用いた結果は，第12-

，6図と同じであった。第12-7図は，試料内のポテンシャルと電荷の関を求めるのに表面電荷法を用いた電荷分布の計算例である。そして，第12-8図は，その場合の電位分布の計算結果である。これらの結果は，第12-，6図と比較すればほとんど同じである。なお，表面電荷法を用いた計算で，第12-4図中の境界の等分割された区間（従って，各境界は5区間）に想電荷を置き（12-15）式の計算式によりポテンシャルと電荷の関係がめられた。



(a) A = 5.0　　(b) A = 500.

第12-7図　表面電荷法を用いた場合の電荷分布の計算例

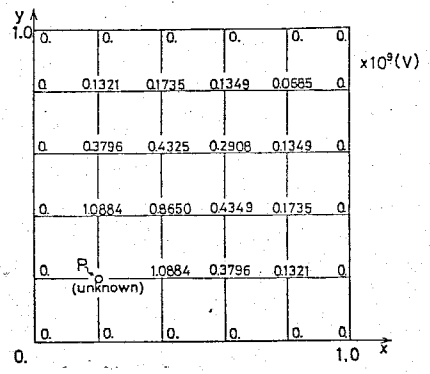


(a) A = 5.0　　(b) A = 500.

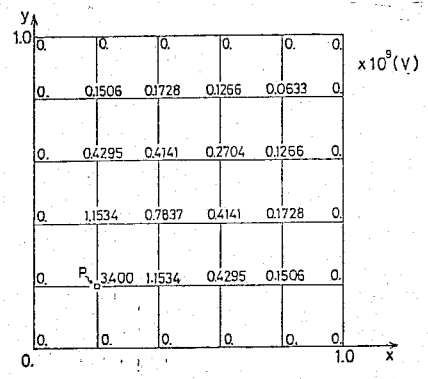
第12-8図　表面電荷法を用いた場合の電位分布の計算例

以上より，試料の形状が二次元の場合にもホッピング数値計算法を用いて試

料内の電荷分布や電位分布などが求められることが明らかとなった。さて，ここで示した計算例では，いずれも扱かう基本方程式は（12－19）式であるから，第12－5図と第12－7図における電荷分布の差は電荷とポテンシャルの関係を求める際の差異によって生じているものと考えられる。そこで，第12－9図に示すように試料内に点電荷を置いた場合の電位分布について，解析解，有限要素法又は差分法，及び表面電荷法を用いた場合について比較した。これらの値は，一点に電荷があり他の点にはないときのものであるから，例えば表面電荷法で言えば（12－15）式の係数行列（一行）に相当するものである。

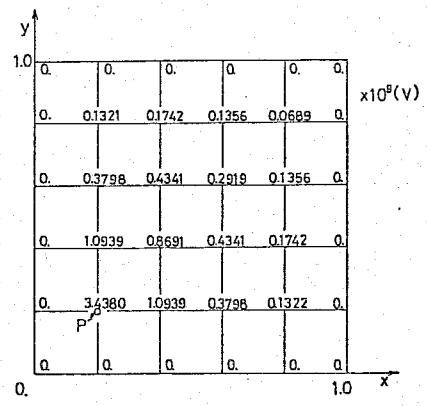


（a） 解析解



（b）有限要素法又は差分法

第12－9図　P点に1C/mの単位電荷を置いた場合の各種計算法の比較



（c）表面電荷法による計算例

第12－9図の計算例中，（a）の解析解については次式で示されるが，20項目まで計算した場合と，30項目まで計算した場合は大差なく図に記され

ている値であった。

$$\phi(x,y)=\sum_{m=1}^{\infty}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{4\sin(0.2\pi m)\sin(0.2\pi n)}{\varepsilon_0\pi^2(m^2+n^2)}\sin\pi mx\sin\pi ny$$

・・・・・（12－20）

第12－9図の各計算結果を比較するとき，（c）の表面電荷法による計算結果が（b）の有限要素法などによる計算よりも（a）の解析結果に近いことから，表面電荷法の方がこの場合には有効と考えられよう。従って，第12－7図の方が第12－5図の結果よりも電位と電荷の関係については実際に近いと考えられる。しかしながら，ここにあげた計算例は解析解のわかっている特殊な場合であり，実際にはポアソンの式を解析的に解くことはほとんど困難であるから，各種計算法の結果を比較してゆくことが必要であろう。とりわけ，本論文で扱かっている非線型現象についてはこのことは当てはまるであろう。

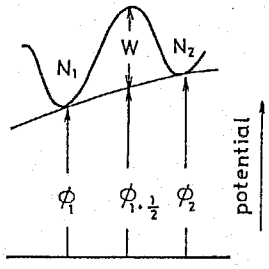
12－6　ホッピング数値計算法の等価回路モデル

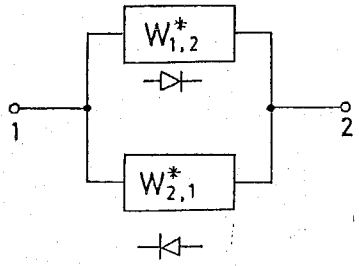
前節までにホッピング数値計算法を用いれば，任意形状の絶縁体試料に対する電導現象が扱かえることが明らかとなった。しかしながら，ホッピング数値計算法の取扱いを一般化しておけば，一層容易に任意形状の絶縁体試料についての電導特性や電界の計算が行なえる。そのための手段として，この節では空間電荷電界によるドリフトと拡散からなる電流の式で定まる電導現象に対する等価回路モデルを考える。そこで，まず一次元ホッピングモデルに対する等価回路について述べよう。

<12－6－1>　一次元ホッピング数値計算法の等価回路モデル

（a）要素の等価回路

前章までに詳しく述べたように，ホッピングモデルを用いて試料内の電荷（正イオンとする）の挙動を記述するためには，第12－10図に示すようにポテンシャル井戸を考え，その間に高さWのポテンシャルの山があるとする。そして，ポテンシャル井戸に存在するイオン粒子が，外部より印加される電界と





（a）二つのポテンシャル井戸のある場合のホッピングモデル　（b）（a）図に対する等価回路モデル

第12-10図　ホッピングモデルとその等価回路

イオン粒子の作る電界により隣接する井戸間を遷移して移動する。いま，第12-10図（a）を参照して，1の井戸より2の井戸に流れる電流$J_{1,2}$を記述すれば，

$$J_{1,2} = \omega_{1,2} q N_1 - \omega_{2,1} q N_2 \quad \cdots\cdots (12-21)$$

となる。ただし，N_1，N_2はそれぞれ1，2の井戸におけるイオン数であり，qはイオンの電荷である。そして，（12-21）式の遷移確率$\omega_{1,2}$，$\omega_{2,1}$は，1，2の井戸のポテンシャルをϕ_1，ϕ_2，1と2の井戸の中間のポテンシャルを$\phi_{1+\frac{1}{2}}$として次のようである。

$$\omega_{1,2} = \nu \exp\left(-\frac{W}{kT}\right) \exp\left\{-\frac{q}{kT}(\phi_{1+\frac{1}{2}} - \phi_1)\right\}$$

$$\omega_{2,1} = \nu \exp\left(-\frac{W}{kT}\right) \exp\left\{-\frac{q}{kT}(\phi_{1+\frac{1}{2}} - \phi_2)\right\} \quad \cdots\cdots (12-22)$$

上述のモデルを用いて，1と2の井戸で構成される系を（12-21）式の電流の式を用いて記述すれば，1から2の井戸へ流れる電流と2から1の井戸へ流れる電流により表わされるから，1および2の井戸への流入電流をJ_1，

J_2として次のようになる。

$$\mathbb{J} = \mathbb{W} \cdot \mathbb{N}$$

ただし、

$$\mathbb{J}^T = [J_1, J_2], \quad \mathbb{N}^T = [\delta N_1, \delta N_2]$$

$$\mathbb{W} = \begin{bmatrix} -\omega_{1,2} & \omega_{2,1} \\ \omega_{1,2} & -\omega_{2,1} \end{bmatrix}$$

・・・・・（12－23）

上式より，この系は粒子の遷移を表わす成分のみからなるマトリクスW（以後遷移マトリクスと呼ぶ）によって特徴づけられることがわかる。そして，この系を等価回路を用いて表現する場合には，第12－10図（b）に示す素子により行なうのが妥当と考えられる。ただし，図中の$\omega_{1,2}^*$，$\omega_{2,1}^*$は，（12－23）式においては遷移確率を意味していたが，等価回路として表現された場合には，$\omega_{1,2}^*$，$\omega_{2,1}^*$の特性を持つ素子を意味している。また，第12－10図（b）の等価回路は試料の一部分を表わす単位と考えられるので，有限要素法の場合にならって要素，さらにポテンシャル井戸に相当する図中の1，2の点を節点と呼ぶことにする。

以上のようにして試料の一部は等価回路で表わせるが，その場合の各要素は以下の性質を有することになる。

（i）$\omega_{1,2}^*$，$\omega_{2,1}^*$は一方向のみの電荷の移動を許す素子である。

（ii）素子$\omega_{1,2}^*$，$\omega_{2,1}^*$の電圧依存性は，節点1，2の間の電位ϕ_1，ϕ_2の差によって定まり，

$$\omega_{1,2}^* = \omega_{2,1}^{*-1} = \exp\left\{-\frac{q(\phi_2 - \phi_1)}{2kT}\right\}$$

・・・・・（12－24）

ただし，節点1，2の間では電位は直線的に変化するとしている。

（iii）各素子を流れる電流の大きさは，節点における電荷δN_1，δN_2に，（12－24）式の$\omega_{1,2}^*$，$\omega_{2,1}^*$を乗じたものである。

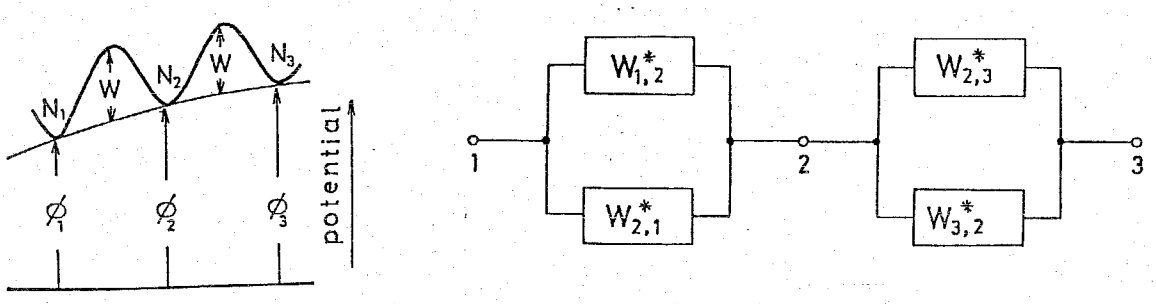
（i）～（iii）の性質を有する素子としてはダイオードが考えられる。ただ

し，通常のダイオードではその特性が，試料を流れる電流をI，印加電圧をVとして，I∝exp（V/kT）で示されるが，この素子は節点の電荷数にも制限される。それは，通常のダイオードでは供給される電荷は十分あるが，この素子では試料内の空間電荷電界や拡散により，各節点で制限された電荷しか存在しないためである。また，（12-24）式の$\omega_{1,2}^{*}$，$\omega_{2,1}^{*}$に対しては，（12-22）式のνexp（-W/kT）の項を省略したが，この項は試料の物性定数，つまり緩和時間の逆数で，試料全体にわたり共通であると考えているためである。勿論，試料が均一でない場合にはこの項も付け加えておけばよい。

以上のように，一つの要素は等価回路によって表現され，その要素の持つ性質は遷移マトリクスWにより示されることが明らかとなった。そして，この等価回路と遷移マトリクスの関係を用いることにより試料全体を解析することができるが，そのためには要素が接続された場合の等価回路と遷移マトリクスの諸関係を求めておくことが必要になる。

（b） 要素の接続

第12-11図（a）に示すように，ポテンシャル井戸数が3である場合には，各井戸に入る電流J_1，J_2，J_3は次のようである。



（a）三つのポテンシャル井戸のある場合のホッピングモデル　（b）（a）図に対する等価回路

第12-11図　要素の接続とその等価回路

$$\begin{bmatrix} J_1 \\ J_2 \\ J_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\omega_{1,2} & \omega_{2,1} & 0 \\ \omega_{1,2} & -\omega_{2,1} & -\omega_{2,3} \quad \omega_{3,2} \\ 0 & \omega_{2,3} & -\omega_{3,2} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \delta N_1 \\ \delta N_2 \\ \delta N_3 \end{bmatrix}$$

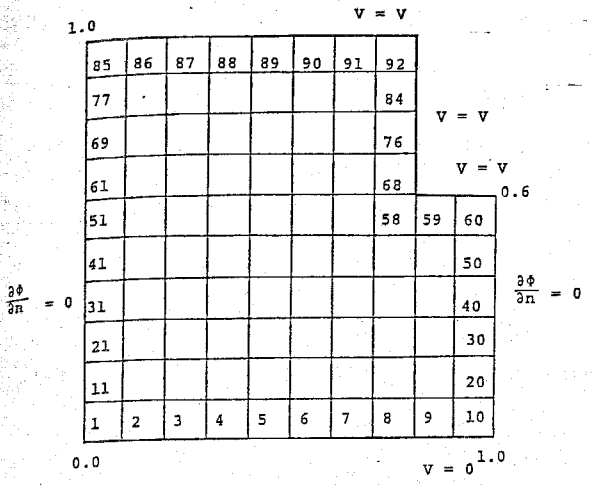
・・・・（12－25）

そして，第12－11図（a）に対する等価回路は同図（b）で示すように，2つの要素を節点（この場合，節点2）において接続することにより得られる。（12－25）式の遷移マトリクスの中の点線で囲んだ部分は，（12－23）式の要素の遷移マトリクスになっていることをみれば，要素を接続した場合の遷移マトリクスは各要素の遷移マトリクスを合成して容易に得られることがわかるであろう。このことは，二次元の場合（三次元でも同様）の接続に於ても同様に遷移マトリクスを記述できるものである。このような遷移マトリクスの構成は，有限要素法において全体の系のマトリクスを合成するときと同様な手法である。

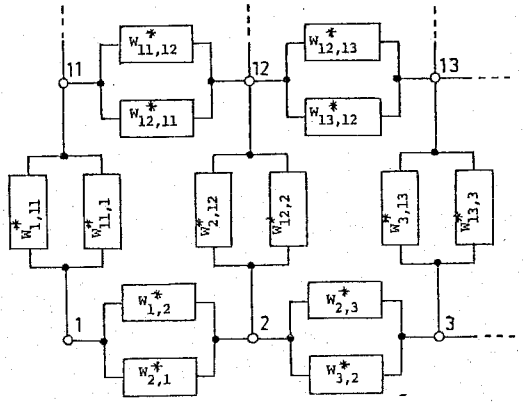
さて，系全体の遷移マトリクスWが（12－24）式で示されるようにポテンシャルの関数，従って電荷数の関数となることから，電荷数とポテンシャルの関係を求めておくことが必要となるが，それには前節における計算法を用いることができる。

<12－6－2>　等価回路モデルを用いた数値解析とその計算例

<12－6－1>で得られた結果をもとにし，等価回路を用いて遷移マトリクスを合成し，与えられた試料に対する電荷分布の解析を試みた。第12－12図は計算に用いた試料で，形状及び境界条件は図に示す通りである。この条件で試料を縦，横10等分の正方形状の領域に分割し，以下の仮定のもとに解析を行なった。すなわち，各領域の中心にポテンシャル井戸があるとし，そこに節点を置いて解析を行なった。図中の番号は，領域の番号を表わしている。ところで，ここでの電荷数とポテンシャルの関係は表面電荷法により第12－2表（a）の計算結果が利用された。従って，（12－15）式を用いれば，



第12-12図　計算に用いられる試料とその分割及び境界条件



第12-13図　第12-12図に対する等価回路の一部

任意電荷分布が与えられると境界条件を満足するように各井戸の電位を計算できる。第12-12図の等価回路を示せば，その一部は第12-13図のようになるが，回路素子の特性はこの電位から(12-24)式を用いて求められる。そして，第12-13図のように素子を接続して全体の等価回路が作られると，<12-6-1>の手順により全体の系の遷移マトリクスWが構成される。この構成は電算機で行なわれ，結果は次のようである。

$$W = \begin{bmatrix} -\omega_{1,2} - \omega_{1,11}, \omega_{2,1}, \cdots, \omega_{11,1}, \cdots \\ \omega_{1,2}, -\omega_{2,1} - \omega_{2,3}, \cdots \\ \cdots \\ 0, \cdots, \omega_{91,92}, -\omega_{92,84} - \omega_{92,91} \end{bmatrix} \quad \cdots\cdots (12-26)$$

以上より，全体の系を表わす関係式として，

$$\mathbb{J} = W \cdot N \quad \cdots\cdots (12-27)$$

なる連立方程式が得られるが，ここでは定常状態を扱かうので，$\mathbb{J} = 0$となる。ただし，試料内の電荷数が一定の場合を扱かっているのでこの条件を代入する必要がある。これは，(12-26)式のWの一行を置換することで行なえる。

すなわち，92行目を置換するとすれば，その場合得られるマトリクスを$\tilde{W}$として，

$$\tilde{W} = \begin{bmatrix} -\omega_{1,2} - \omega_{1,11}, \omega_{2,1}, \cdots, \omega_{11,1}, \cdots \\ \omega_{1,2}, -\omega_{2,1} - \omega_{2,3}, \cdots \\ \cdots \\ 1, 1, \cdots, 1 \end{bmatrix} \quad \cdots\cdots (12-28)$$

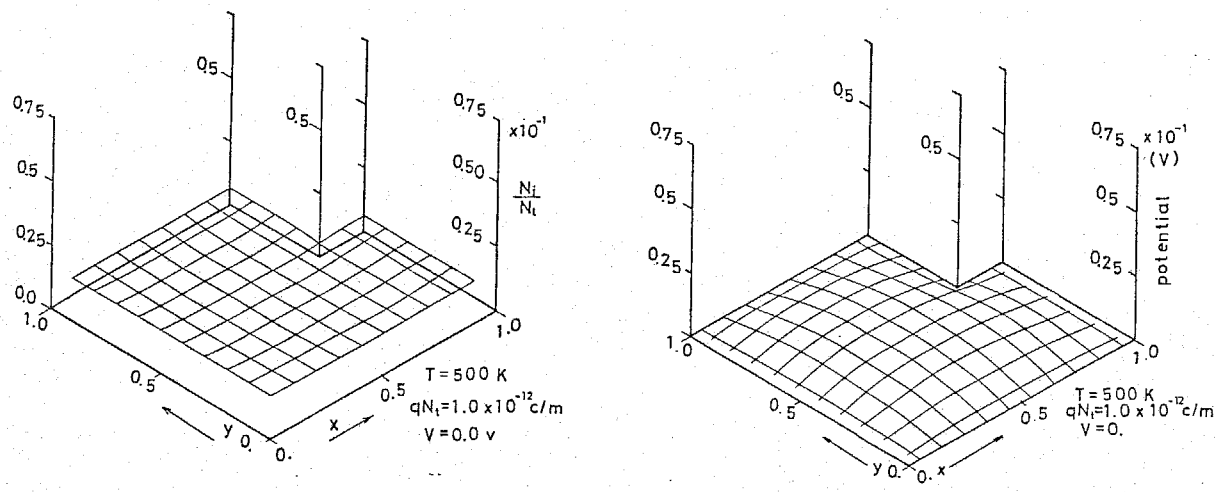
とする。そして，この$\tilde{W}$を用いて，

$$\tilde{W} \cdot N = \mathbb{C} \quad \cdots\cdots (12-29)$$

として，(12-29)式を解くことで電荷分布の計算が行なわれる。ここでは計算法としてはニュートン法が用いられた。ただし，(12-29)式で，$\mathbb{C}$は$\mathbb{C}^T = (0, 0, \cdots, \rho N_t)$なる行列である。

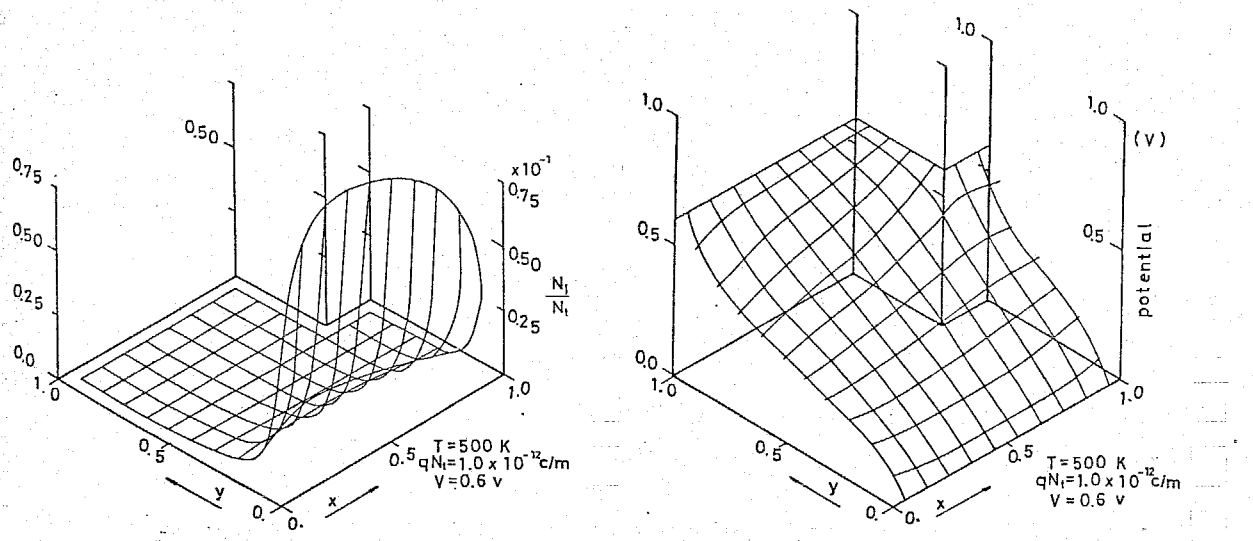
(12-29)式の計算は，$\tilde{W}$がNの関数であることからNewton法による反復計算が行なわれ，第12-12図に対する空間電荷特性の解析が行なわれた。第12-14図は，$V=0$，$T=500K$，$\rho N_t = 1.0 \times 10^{-12}$ c/mとした場合の計算例で，(a)図がその電荷分布を示し，(b)図がその場合の電位分布の計算結果である。同図より，あまり明確ではないが電荷分布は中心で電荷密度が小さくなる特性を示すことがわかる。この分布に対応して電位分布は試料中心部で高電圧となる特性を示している。第12-15図は第12-14図と同様の条件で印加電圧Vを-0.6Vとして計算した例である。(a)図はその場合の電荷分布，(b)図が電位分布を示している。(a)図より電荷はほとんど一方の電極側に引き寄せられることがわかる。また，(b)図より電荷の引き寄せられた電極側で電界が緩和される傾向を示していることも明らかであろう。これは空間電荷による効果が電荷の寄せられた側で強くでているものと考えられる。第12-16図は，第12-15図と逆のV$=-0.6$Vの電圧を印加した場合の電荷分布の計算例である。同図より電荷は電極付近に集まるが，第12-15図の結果とは逆になっている。

以上のようにして，任意形状の試料に対して電荷分布特性などを計算できることは明らかであろう。



（a）電荷分布の計算例　　（b）電位分布の計算例

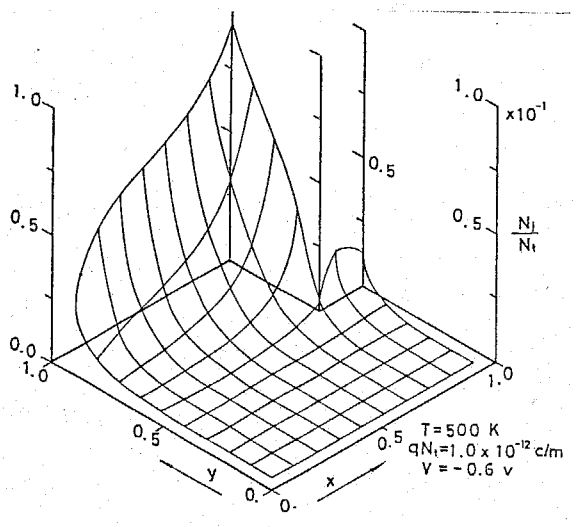
第12－14図　試料内の空間電荷特性の計算例（T＝500 K，V＝0，qN_t＝1.0×10^{-12} C/m）



（a）電荷分布の計算例　　（b）電位分布の計算例

第12－15図　試料内空間電荷特性の計算例（T＝500 K，V＝0.6 V，qN_t＝1.0×10^{-12} C/m）

第12-16図
試料内空間電荷分布の計算例
(T=500k, V=-0.6V
qNt=1.0×10⁻¹² c/m)



<12-6-3> 数値解析に対する検討

(a) $f_{i,j}$ の計算値について

(12-12)式に示すように，$f_{i,j}$ の値は二重積分により得られるが計算は厄介である。これに対して一つの領域内にある電荷が井戸の中心にすべてあると考えると，ポテンシャルϕは，$r=\sqrt{(x-x')^2+(y-y')^2}$として次のようになる。

$$\phi=\frac{1}{2\pi\varepsilon}\ln\frac{k}{r} \qquad \cdots\cdots(12-30)$$

(12-30)式と，一つの領域内の電荷分布は一様であるとして，(12-12)式で計算されるポテンシャルを比較する。(12-12)式によるポテンシャルは，$y=y'$, $x'-x=r$とおけば，

$$\phi=\frac{1}{2\pi\varepsilon}\left(\ln\frac{k}{r}+A\left(\frac{r}{h}\right)\right) \qquad \cdots\cdots$$

$$A\left(\frac{r}{h}\right)=\frac{3}{2}-\frac{r}{2h}\ln\frac{(1+h/2r)^2+(h/2r)^2}{(1-h/2r)^2+(h/2r)^2}$$

$$-\frac{1}{4}\ln\left\{\left(1+\frac{h}{2r}\right)^2+\left(\frac{h}{2r}\right)^2\right\}\left\{\left(1-\frac{h}{2r}\right)^2+\left(\frac{h}{2r}\right)^2\right\}$$

$$-\left(\frac{r}{h}+\frac{1}{2}\right)^2 \arctan\frac{1}{1+2r/h}$$

$$-\left(\frac{r}{h}-\frac{1}{2}\right)^2 \arctan\frac{1}{-1+2r/h}$$

$$-\frac{1}{4}\left\{\arctan\left(1+\frac{2r}{h}\right)-\arctan\left(1-\frac{2r}{h}\right)\right\}$$

・・・・(12-31)

上式の適用範囲としてr≧h，つまり隣接する井戸間距離以上離れた範囲で考えると，A(r/h)≒0で近似されることがわかる。たとえばA(1)=-4.0×10^{-3}，A(10)=-4.1×10^{-7}，A(100)=-4.1×10^{-10}となる。従って，(12-31)式で|k-r|≫0となるようなkの値を選らべば，(12-31)式は(12-30)式で近似的に表わせることになる。このことは，$f_{i,j}$ (i≠j)の値が(12-30)式で定められることを意味している。次に$f_{i,i}$の値，つまり一つの領域内における電荷がその中心に作るポテンシャルを考える。この値は(12-12)式で，x=x'，y=y'として得られ，

$$\phi=\frac{1}{2\pi\varepsilon}\left(\ln\frac{k}{h}+1.061\right)$$

・・・・(12-32)

となる。一方，ポアソンの式に5点差分式を用いて近似すれば次のようである。

$$\phi=\frac{1}{2\pi\varepsilon}\left(\ln\frac{k}{h}+\frac{\pi}{2}\right)$$

・・・・(12-33)

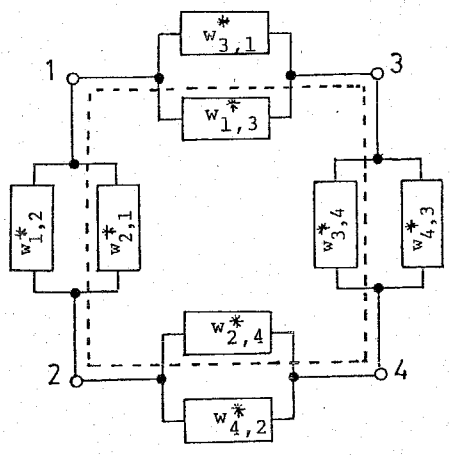
(12-32)，(12-33)式を比較すれば，r>hの場合と同様に，|k-h|≫0が満たされるとき，(12-32)式が(12-33)式で近似されることがわかる。

以上を整理すれば，$f_{i,j}$の値は，kの値としてk≫rが満たされるように

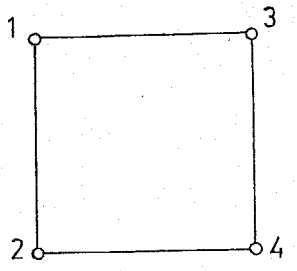
すれば，$i \neq j$ならば（12－30）式で，$i = j$ならば（12－33）式で近似できると考えられる。

（b） 単位要素による遷移マトリクスの合成について，[91]

〈12－6－1〉で述べたように，任意の形状の試料に対して境界条件を満足するようにポテンシャルと電荷数の関係を導き，この結果と等価回路モデルを用いて全体の遷移マトリクスを構成したが，その構成の仕方にも問題がある。〈12－6－2〉では，第12－10図（b）で示された要素を単位として，節点での結びつきを考えて構成したが，これを電算機で行なう場合には入力も多く厄介である。しかし，いくつかの要素をまとめてこれを単位として構成することも可能である。第12－17図（a）は，節点1，2，4，3で囲まれた部分を表わしているが，これを一つの単位として全体の遷移マトリクスを作成することも可能である。すなわち，この場合の等価回路は同図（b）で示されるが，図中の点線内で囲まれる部分を単位要素と考える。このように考えれば，（b）図の系の基本方程式は（c）図で示されることになる。そこで，こ



（b） 一要素（（a）図）に対する等価回路

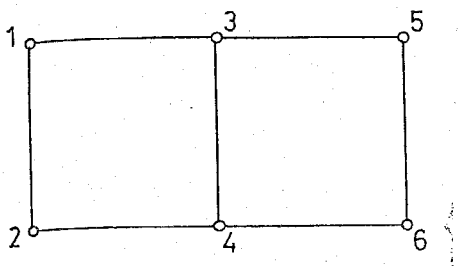


（a） 計算に用いられる一要素

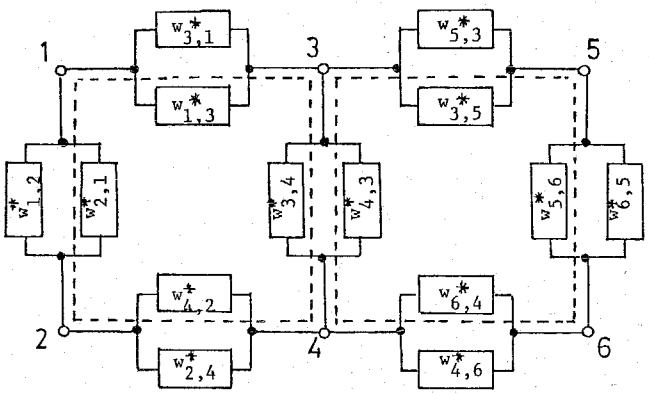
$$\begin{vmatrix} J_1 \\ J_2 \\ J_3 \\ J_4 \end{vmatrix} = \frac{1}{\delta} \begin{vmatrix} -W_{1,3} & W_{2,1} & 0 & 0 \\ 0 & -W_{2,1} & 0 & W_{4,2} \\ W_{1,3} & 0 & -W_{3,4} & 0 \\ 0 & 0 & W_{3,4} & -W_{4,2} \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} N_1 \\ N_2 \\ N_3 \\ N_4 \end{vmatrix}$$

（c） （b）図の要素の基本方程式

第12－17図 単位要素の合成法について



（a）接点3，4で接続された二要素



（b）（a）図に対する等価回路

$$
\begin{vmatrix} J_1 \\ J_2 \\ J_3 \\ J_4 \\ J_5 \\ J_6 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} -W_{1,3} & W_{2,1} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -W_{2,1} & 0 & W_{4,2} & 0 & 0 \\ W_{1,3} & 0 & -W_{3,4}-W_{3,5} & W_{4,3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & W_{3,4} & -W_{4,2}-W_{4,3} & 0 & W_{6,4} \\ 0 & 0 & W_{3,5} & 0 & -W_{5,6} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & W_{5,6} & -W_{6,4} \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} N_1 \\ N_2 \\ N_3 \\ N_4 \\ N_5 \\ N_6 \end{vmatrix}
$$

（c）　（b）図の接続された二要素の基本方程式

第12－18図　　接続された二要素と遷移マトリクスの合成

の単位要素に対して，節点3，4，6，5で囲まれる単位要素を節点3，4で接続する場合を考えてみる。第12－18図（a）がその様子を表わし，同図（b）がその等価回路である。そして，その場合の系の基本方程式は同図（c）で示される。この（c）図を見ると，第12－17図（c）で示される一つの単位要素の遷移マトリクスが，点線で示すように節点3，4における要素を中心として接続されていることがわかる。

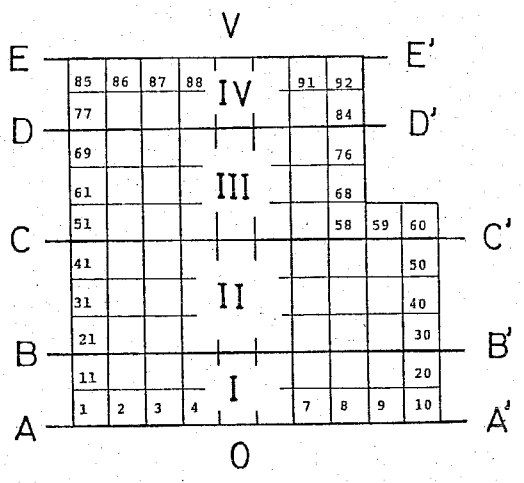
以上より，全体の系の遷移マトリクスは，これ以外にもいくつかの要素をまとめ，これを単位として接続して構成してゆくことができるであろう。ただし，第12－17図（b）で示した部分を単位要素として系全体のマトリクスを構成する場合には，境界における要素は別に考慮されねばならない。すなわち，第12－18図（b）が全体の系である場合，第12－17図（b）を単位要

素として遷移マトリクスを構成すれば，点線の外側の素子，$W_{1,2}^{*}$，$W_{2,4}^{*}$，$W_{4,6}^{*}$，$W_{6,5}^{*}$，$W_{5,3}^{*}$，$W_{3,1}^{*}$は考慮されないから，これに対しては後に付け加えなければならない。

次節では，以上の結果をユニットという考え方を導入することによりさらに一般化しよう。

12-7 ユニットによる遷移マトリクスの合成について[91]

有限要素法では，要素数が多い場合，そのままでは大きなマトリクスを扱かわねばならないので，全体をいくつかの部分（これをユニットと呼ぶ）に分割して計算する方法がとられる。ホッピング数値計算法における全体の系の遷移マトリクスも，分割する領域の数が多い場合には大マトリクスとなり電算機における容量の面から考えてもそのままでは扱かえない。このような問題に対しては，上記有限要素法のユニットの考え方を有効に活用して，遷移マトリクスの合成と（12-29）式で示されるマトリクス計算を工夫して解決することができる。以下に第12-12図を例にとり説明する。



第12-19図 試料のユニット分けと分割の仕方

第12-19図で示すように，A-A′，B-B′，C-C′，D-D′，E-E′の境界線で，I，II，III，IVなる4個のユニットに分割するとしよう。ただし，それぞれのユニットは第12-3表に示す領域と関係したものとする。

そのように考えるとき，全体の系の遷移マトリクスの合成をユニット間の遷移マトリクスの合成で考えることができる。そのためには，対象とする試料の領域外に，O，Vなる二つのユニットを仮定し，ユニット間の遷移マトリクスを

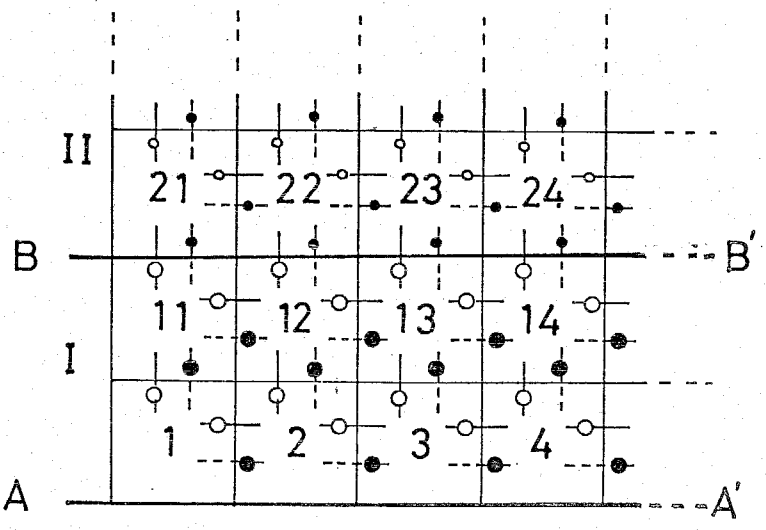
ユニットの番号	関係する領域
I	1 - 20
II	21 - 50
III	51 - 76
IV	77 - 92

第12-3表　ユニット分けと領域の関係

次のように約束する。

$W_{i,i+1}$ ：ユニット i 内の領域と領域を結ぶ素子 $\omega_{i,j}$ のうち，$i<j$ なるものと，ユニット i とユニット $i+1$ の領域とを結ぶ素子のうち，ユニット i からユニット $i+1$ への遷移を表わすものを成分とするマトリクス

$W_{i,i-1}$ ：ユニット i 内の領域と領域を結ぶ素子 $\omega_{i,j}$ のうち，$i>j$ なるものと，ユニット i とユニット $i-1$ の領域とを結ぶ素子のうち，ユニット i からユニット $i-1$ への遷移を表わすものを成分とするマトリクス



第12-20図
ユニット分けと遷移マトリクス成分の分類

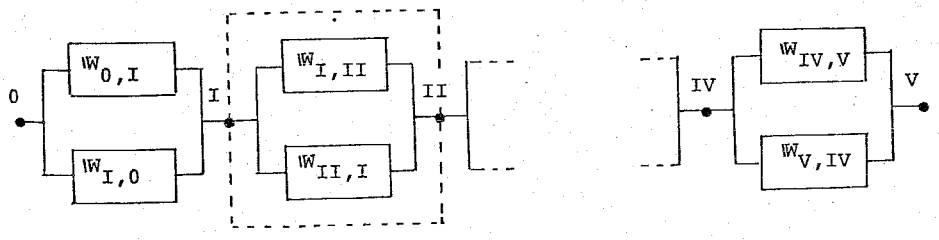
○ $W_{I,II}$ の成分
● $W_{I,0}$ の成分
◦ $W_{II,III}$ の成分
• $W_{II,I}$ の成分

従って，第12－19図のようにユニット分けした場合，遷移マトリクスの各成分はその一部分を示せば第12－20図のように分類された素子によって構成される。そして，例えばⅠのユニットからⅡのユニットへの遷移マトリクス$W_{Ⅰ,Ⅱ}$は第12－21図のように記述される。

さて，以上述べたユニット分けとユニット間の遷移マトリクスについては次のことを注意しておく必要があろう。すなわち，領域の番号付けは第12－19図に示されたように行なうということである。そして，それにより初めて上記の$W_{i,j}$の定義が有効となるわけである。（有限要素法における直列接続の考え方とユニット番号の若い方から順に領域に番号を付けるということ）

第12－21図
遷移マトリクス$W_{Ⅰ,Ⅱ}$の表示

	1	・・・・	10	11	・ ・	20
1	$W_{1,2}+W_{1,11}$	0	0	0	0	0
・	・	・	・	・	・	・
・	・	・	・	・	・	・
・	・	・	・	・	・	・
10	0	0		0	0	0
11	0	0	0	$W_{11,12}+W_{11,21}$	0	0
・	・	・	・	・	・	・
・	・	・	・	・	・	・
20	0	0	0	0	0	$W_{20,30}$



第12－22図　第12－19図の等価回路（ユニット単位の等価回路）

上述のようにしてユニット間の遷移マトリクスを約束すれば，第12-19図で示される系は，このマトリクスを用いて第12-22図のようにユニットを単位とする等価回路で表現されることは明らかであろう。このことは前述した要素を単位とする等価回路をユニットを単位とする等価回路に拡張したものと考えられる。そして，ユニットを接続することによって得られる合成マトリクスについても，要素を接続した場合と同様な結果となることが以下のように示される。

まず，全体の系は，第12-22図の節点と節点の間の部分を一つの系（この場合，ブロックと呼ぶことにする）として，この単位で構成されているものと考え直すことができる。そして，一つの系，例えば図の点線で囲まれる節点ⅠとⅡの間のブロックを特徴づける電流の基本式は次のようになる。

$$\begin{bmatrix} \mathbb{J}_{\mathrm{I}} \\ \mathbb{J}_{\mathrm{II}} \end{bmatrix} = \wp \begin{bmatrix} -\mathbb{W}_{\mathrm{I,II}} & , & \mathbb{W}_{\mathrm{II,I}} \\ \mathbb{W}_{\mathrm{I,II}} & , & -\mathbb{W}_{\mathrm{II,I}} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \mathbb{N}_{\mathrm{I}} \\ \mathbb{N}_{\mathrm{II}} \end{bmatrix} \quad \cdots (12-34)$$

ただし，$\mathbb{J}_{\mathrm{I}}$は，ユニットⅠ内の各領域に流入する電流全体を表わすマトリクスで，領域iへ流入する電流をJ_iとして，$\mathbb{J}_{\mathrm{I}}^{T} = (J_1, J_2, \cdots, J_{20})$である。また，$\mathbb{N}_{\mathrm{I}}$は各ユニット内の各領域における電荷数を表わすマトリクスで，領域iの電荷数をN_iとするとき，$\mathbb{N}_{\mathrm{I}}^{T} = (N_1, N_2, \cdots, N_{20})$となる。

そして，（12-34）式の基本方程式で特徴付けられる二つのブロックが節点Ⅱで接続される場合の系を表わす電流の式は，

$$\begin{bmatrix} \mathbb{J}_{\mathrm{I}} \\ \mathbb{J}_{\mathrm{II}} \\ \mathbb{J}_{\mathrm{III}} \end{bmatrix} = \wp \begin{bmatrix} -\mathbb{W}_{\mathrm{I,II}} & , & \mathbb{W}_{\mathrm{II,I}} & , & 0 \\ \mathbb{W}_{\mathrm{I,II}} & , & -\mathbb{W}_{\mathrm{II,I}} & - \mathbb{W}_{\mathrm{II,III}} & , & \mathbb{W}_{\mathrm{III,II}} \\ 0 & , & & \mathbb{W}_{\mathrm{II,III}} & , & -\mathbb{W}_{\mathrm{III,II}} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \mathbb{N}_{\mathrm{I}} \\ \mathbb{N}_{\mathrm{II}} \\ \mathbb{N}_{\mathrm{III}} \end{bmatrix}$$

$$\cdots\cdots (12-35)$$

となることが容易にわかる。この結果は要素を接続した（12-25）式と同

様であり，前述の考え方が一般化されたことがわかる。なお，（12－35）式の点線で囲まれた部分は一つのブロックを表わしている。従って，（12－35）式を導いた時と同様の手順で第12－22図の等価回路で示される全体の系を表わす電流の基本式を導けば次式のようになる。

$$
\begin{vmatrix} J_0 \\ J_I \\ J_{II} \\ J_{III} \\ J_{IV} \\ J_V \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} -W_{0,I} & W_{I,0} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ W_{0,I} & -W_{I,0}-W_{I,II} & W_{II,I} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & W_{I,II} & -W_{II,I}-W_{II,III} & W_{III,II} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & W_{II,III} & -W_{III,II}-W_{III,IV} & W_{IV,III} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & W_{III,IV} & -W_{IV,III}-W_{IV,V} & W_{V,IV} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & W_{IV,V} & -W_{V,IV} \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} N_0 \\ N_I \\ N_{II} \\ N_{III} \\ N_{IV} \\ N_V \end{vmatrix}
$$

・・・・・（12－36）

上式中，第12－19図で示されるI～IVのユニットを表わす部分が図中の実線で囲まれる部分で，これが求めるべき与えられた対象の全体の系を表わす遷移マトリクスとなる。以上のことから，ユニット間の遷移マトリクスを定義して系の等価回路を考え，それを元にして全体の遷移マトリクスを合成できることが明らかとなった。そして，このような考え方をすれば，領域がもっと大きくなる場合も同様に扱かうことができるであろう。

さて，得られた全体の遷移マトリクス，すなわち（12－36）式の実線で囲まれた部分のマトリクスについて次の点に注目することは電算機による大マトリクス計算において重要である。それは，得られた行列が帯行列となっているということである。このことは図中の点線で囲まれた部分の成分についてのみ記憶しておけばよいことを意味している。有限要素法はマトリクス合成においてこの性質を最大限利用して，大きな次元のマトリクス計算を行なっている。このことから，ホッピング数値計算法においても同様にこの性質を使って領域数が大きくなった場合も記憶容量を大幅に減らして扱かうことができるであろう。

以上，有限要素法におけるユニット分けと直列接続の考え方をホッピング数値計算法に適用することで，全体の系の遷移マトリクスについてそれを帯行列として表現できることを明らかにした。ところで，最終的には境界条件を代入して得られる（12-29）式の連立方程式を解くことが基本となるが，係数が帯行列となる性質を用いれば計算は容易に行なえる。この種の連立方程式の解法については付録10に整理した。

12-8. ユニットを単位とするホッピング数値計算法の基本方程式について

前節では，全体の系をユニットに分割して考えると，その等価回路は第12-22図のようにブロックの接続として示され，その場合一つのブロックに対する電流の基本式は（12-34）式で表現されることを明らかにした。

本節では，ユニットを単位とするホッピング数値計算法の基本方程式を導くが，ユニット単位では系を直列接続して第12-22図のように表現できるのであるから，逆に一つのユニットに関する電荷の運動方程式は次式で示されることは容易に類推されよう。例えばi番目のユニットについては，

$$\frac{dN_i}{dt} = W_{i-1,i} N_{i-1} - W_{i,i-1} N_i - W_{i,i+1} N_i + W_{i+1,i} N_{i+1} \qquad (12-37)$$

上式の$W_{i,i+1}$やN_iなどは前節ですでに述べた通りである。

（12-37）式からもわかるように，この式は一次元ホッピングモデルを導いた際の基本方程式と一致している。このことは一次元の拡張と考えられ，一次元で行なってきた解析などはすべてこの一般化されたホッピングの基本方程式に対しても用いることができるであろう。そして，誘電体に限らず，イオン結晶や高分子などで構造的に同じ単位で結晶構造が構成される場合には，（12-37）式の考え方に従って電荷の挙動をより直接的に扱えるであろう。

12-9 まとめ

本章では，ホッピングモデルを二次元に拡張することにより，空間電荷電界を考慮しての拡散電流とドリフト電流によって形成される二次元の空間電荷特性の解析法と計算例を示した。前段で用いた計算例は，比較的形状の簡単な正方形状の場合で，後段に用いた例は凹型試料であった。両者の計算よりホッピング数値計算法を用いれば空間電荷特性が容易に評価できることが示された。また，更に複雑な形状の場合にも同様に適用できるであろう。たとえば実用機器としてのケーブルにはトリー破壊があり，その場合突起先端での電界を扱かうためには二次元，三次元として考えねばならない。このような問題には適用できると思われる。ただし，本章で述べた計算例は絶縁体中に一定の電荷のある場合であったが，このような問題では電極からの電荷の注入を考慮しなければならない。その場合には，(12-27)式のJにこの条件を代入すればよい。そのためには界面における電界と注入電流の関係を知らねばならないが，それには第7章の結果を利用できると考えられる。

本章では，さらにホッピングモデルに対する等価回路モデルを考え，遷移マトリクスの合成をこのモデルによって行なえば容易に作成できることを示した。また，等価回路モデルよりユニット単位に拡張することによって，ホッピング数値計算法を一般化した。

第 13 章　　イオン空間電荷分極TSCの研究

13-1　まえがき[96]~[99]

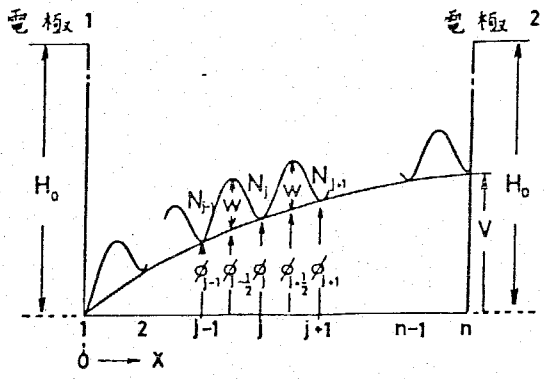
絶縁体において熱刺激電流（TSC）を生じさせる原因の主要なものとしては，双極子の脱分極によるもの，トラップされた電子（または正孔）の伝導帯（または価電子帯）への熱励起によるもの，そしてイオンなどの空間電荷分極によるものがある。これらのうち双極子によるTSCは，単一緩和過程でBucci氏らにより解析されている。[96] また，トラップ電子によるものについてはPerlman氏らにより，双極子の場合と似た関係式が導かれている。[97] しかし，空間電荷分極によるものについてはほとんど行なわれていない。それは，絶縁体中のイオンなどの電荷の挙動は，電荷の作る空間電荷電界によるドリフトと拡散によっており，空間電荷分極によるTSCを解析する場合には両者を含めなければならないが，これを記述する微分方程式を解析的に解くことが困難であるためである。

そこで本章では，前章までにこの種の現象を解析するのに有効であることが明らかとなったホッピング数値計算法を用いてイオン空間電荷分極TSCを扱かう。そして，空間電荷分極TSCの特徴や空間電荷分極TSCと双極子分極TSCとの相違などについて明らかにする。次いでMIS（Al-SiO_2-Si）構造素子のSiO_2絶縁膜中に含まれるNa^+イオンによるTSCの実験結果にこの解析法を適用し，[98] TSC測定時に印加するコレクティング電圧V_cの大きさにより，TSCピーク発生温度が変化する空間電荷分極TSCに特徴的な現象の解明を試みる。さらに，この実験を元にして試料の物性定数の評価も行なう。ところで，MIS試料中のNa^+イオンの挙動については，それがデバイスとして使用される時，素子の特性の不安定性の原因となることから，いままでに多くの研究がされてきた。[8] しかし，SiO_2膜中のNa^+イオンの挙動については不明な点も多く，現在でも研究が続けられている。Hickmott氏はSiO_2膜中のイオンの挙動について，金属－絶縁体および絶縁体－半

導体界面付近にトラップがあるとして(トラップモデルと呼ぶ)種々の現象の解明を試みている。[99] そして，このようなトラップモデルによってイオンの挙動を説明しようとする試みが各所でみられる。本章では，このようなモデルを考えなくても拡散と空間電荷電界によるドリフトを考えるホッピング数値計算法のモデルで十分説明できるものであることも示す。

13－2 イオン空間電荷分極TSCの解析

前章までに詳しく述べてきたように，絶縁体中におけるイオン電荷の挙動が空間電荷電界によるドリフトと拡散によって定まる場合，それらは第13－1図に示すモデルによって考えることができる。すなわち，イオン粒子はホッピング距離 l を隔てた隣接する井戸間で，電荷の作る空間電荷電界の影響を受けながらポテンシャル W の山を越えて遷移しているとする。このように考えると電極1よりj番目の井戸におけるイオン数の時間変化 dN_j/dt は，次式で示される。



第13－1図 ホッピングモデル
(試料内荷電粒子の位置及び電位)

$$\frac{dN_j}{dt} = \omega_{j-1,j} N_{j-1} - (\omega_{j,j-1} + \omega_{j,j+1}) N_j + \omega_{j+1,j} N_{j+1}$$

$$\omega_{j,j+1} = \nu \exp\left(-\frac{W}{kT}\right) \exp\left(-\frac{q}{kT}(\phi_{j+\frac{1}{2}} - \phi_j)\right)$$

$$\omega_{j,j-1} = \nu \exp\left(-\frac{W}{kT}\right) \exp\left(-\frac{q}{kT}(\phi_{j-\frac{1}{2}} - \phi_j)\right)$$

・・・・・ (13－1)

従って，(13－1)式で記述される連立微分方程式を解けば空間電荷分極T

SCを扱うことができる。その場合，TSCでは等温での過渡電流測定と異なり昇温速度をβ（k/sec）とするので，

$$T = \beta t + T_0 \quad （T_0は初期温度）$$

・・・・・（13－2）

とする。また，本章での解析は後述するMIS試料中のNa^+イオンについての実験も考慮して，次の条件を仮定している。

（i）試料内に過剰な単一の可動イオンが存在する。

（ii）電極面は可動イオンに対しブロッキングである。

（iii）可動イオンの遷移は隣接する井戸へのみとする。

（iv）試料内におけるイオンの発生と消滅はない。

上記の条件のもとで，（13－1）式で記述される微分方程式に従ってイオン粒子が運動するとき，外部回路に流れる電流は，分極量Pの時間変化として示される。すなわち，イオン空間電荷分極TSCは付録5－1表を参照し，（13－2）式も考慮して次式で示される。

$$TSC = \beta \frac{dP}{dT} = \beta \frac{q l N_t}{d} \sum_{j=1}^{n} (j-1) \frac{d}{dT}\left(\frac{N_j}{N_t}\right)$$

$$= \beta \frac{q l N_t}{d} \sum_{j=1}^{n-1} (\omega_{j,j+1} N_j - \omega_{j+1,j} N_{j+1})$$

・・・・・（13－3）

以上より，TSCは（13－1）式で記述される微分方程式を解き，（13－3）式に代入してゆけば求められることになる。以後のTSC計算では，第4章の過渡電流計算の際にも用いられたRunge・kutta法が使用されている。

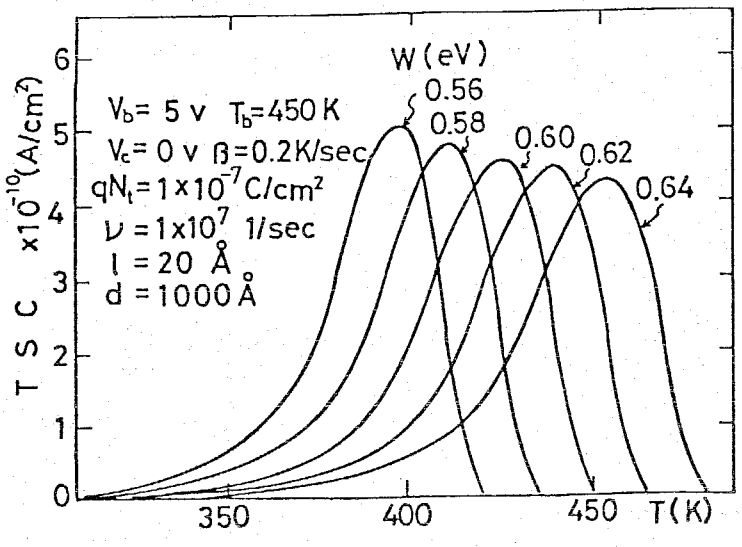
13－3 TSC計算例

前節で述べたイオン空間電荷分極TSCを計算するためには，電荷の初期分布をあらかじめ定めなければならない。バイアス時間t_bが十分長い時には，

試料内ではイオン電荷の移動はなくなり，バイアス電圧（印加電圧）V_b におけるドリフトと拡散のつり合いによって定常分布（飽和状態と呼ぶ）が形成されていると考えられる。従ってこの場合は，第3章で述べたように（13－1）式の左辺の時間微分項を零と置くことにより得られる関係式 $\omega_{j,j+1} N_j = \omega_{j+1,j} N_{j+1}$（$j = 1, 2, \cdots, n-1$）と試料内の単位面積あたりの全イオン量が qN_t なる条件で，N_j について解けばよい。また，バイアス時間 t_b が短かい場合には，試料内でイオン電荷の移動は続いており，過渡的な状態（不飽和状態と呼ぶ）にあると考えられる。この場合の分布は，印加電圧が零の定常状態より，時間 t_b の間バイアス電圧 V_b を印加する第4章の過渡計算から求められる。

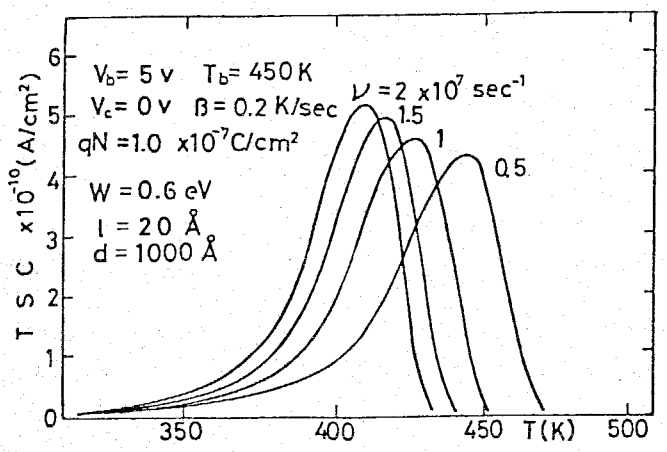
以上のようにして初期分布を定め，実際にイオン空間電荷分極TSCの数値解析を行なうためには，イオン過渡電流を扱かった第4章と異なり，ν，l，Wなどのイオンホッピングパラメータをあらかじめ知る必要がある。そこで，後にMIS試料についてのTSCに関する実験結果を検討するので，試料について測定されている条件とほぼ合わせた値を用いて，ν，Wなどをパラメータとして数値解析を試みた。以下にその結果を示す。

第13－2図は，厚さ $d = 1,000$ Å，$l = 20$ Åの試料で，バイアス電圧 $V_b = 5$ V，バイアス温度 $T_b = 450$ kで飽和状態にあるとき，コレクティング電圧（TSC測定時に印加される電圧）$V_c = 0$ で，昇温速度 $\beta = 0.2$ k/sec とした場合に観測されるTSC曲線を，$\nu = 1.0 \times 10^7$ 1/sec とし

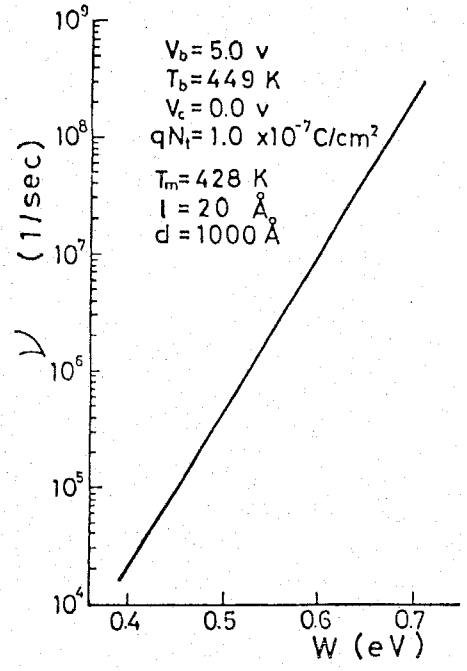


第13－2図　Wを変えた時のイオン空間電荷分極TSCの計算例

てWをパラメータに選んで数値計算した結果である。ただし，試料内の全イオン量 qN_t を $1.0\times10^{-7}\,C/cm^2$ とした。同図より，TSC電流が最大となる温度 T_m（以後，ピーク温度と呼ぶ）は，Wの値が大きくなるに従い高温側に移動することがわかる。同様のことは，第13－3図に示したWの値を一定として，νの値を変えた計算例でもみられ，νの値が大きくなるに従いピーク温度 T_m は低温側に移動している。ただし，計算条件は第13－2図と同様である。



第13－3図　イオンの振動数νを変えた時のイオン空間電荷分極TSCの計算例



第13－4図　T_m でピーク温度を生ずる場合のνとWの関係

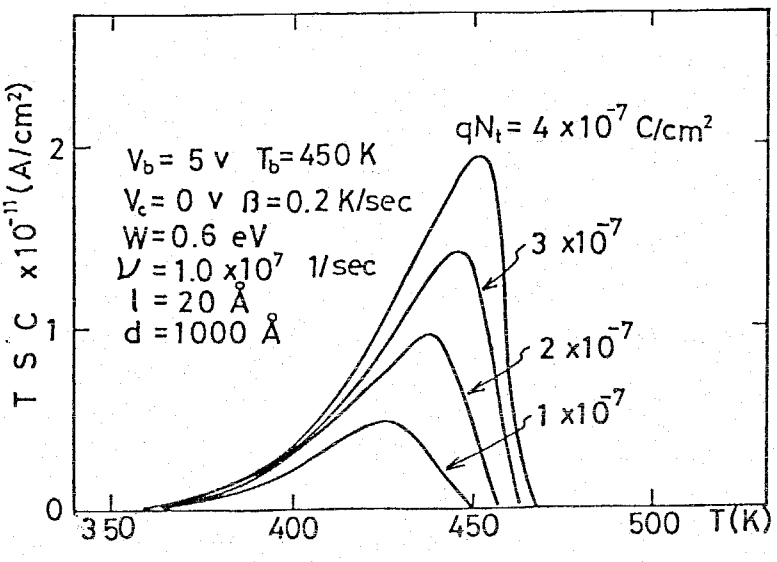
以上のようにTSC電流ピークはνやWによって大きく変化する。ところで，ある決まった温度 T_m でピークを生ずる場合のνとWの関係を調べると規則性のあることがわかる。すなわち第13－4図は，T_m = 428 Kにおいてピーク温度を生ずる場合のνとWの組み合せを $\ln\nu - W$ の関係でプロットしたものであるが，両者の間にはほぼ直線関係があることがわかる。このことは，$\nu\cdot\exp(-W/kT_m)$ の値がある一定の値となるときにピーク温度も決定することを意味している。そして，$\nu\exp(-W/kT_m)$ なる値は，その

温度における移動度μ($=q/kT\cdot\nu l^2 exp(-W/kT_m)$)や拡散定数D($=\nu l^2 exp(-W/kT_m)$)と密接に関係することから，試料のこれらの物性定数が定まれば，試料中の全イオン量や昇温速度が知れると，数値計算によって実験におけるピーク温度T_mを決定できるものと考えられる。本章では，後にMIS試料を対象として数値解析と実験の両面から，試料の物性定数を決定する問題を扱かっている。さて，イオン空間電荷分極TSCでのピーク温度の特徴が明らかとなったが，双極子分極TSCに代表される緩和形のTSCと比較すると両者の間には違いのあることがわかる。すなわち，双極子分極TSCでは，単一緩和過程では，ピーク温度がT_mである場合，νとWの関係は，

$$\frac{\beta W}{kT_m^2}=\nu exp\left(-\frac{W}{kT_m}\right) \quad \cdots\cdots(13-4)$$

となる。この関係は，上述のイオン空間電荷分極TSCの場合とは明らかに異なり，上述のイオン空間電荷分極TSCの場合とは明らかに異なっている。

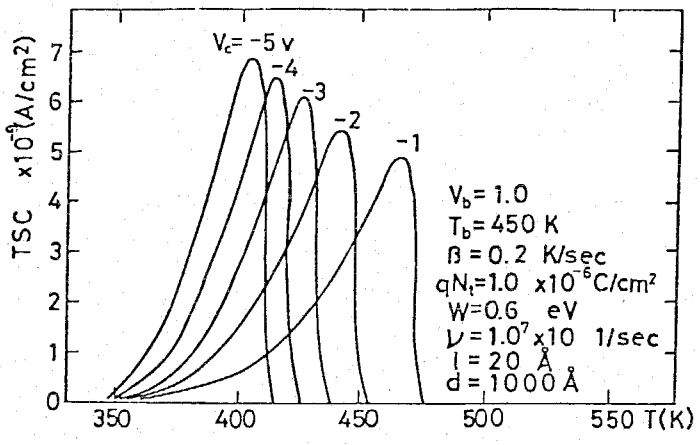
第13-5図は，ν，Wを一定とし，試料内の全イオン量qN_tを変えた場合の計算例である。同図よりイオン量が増加するに従いピーク温度T_mは高温側に移動することがわかる。これはイオン量が増加するほど空間電荷電界の影響が大きくなるためと考えられ，空間電荷分極TSCの一つの特徴であると考えられる。それは，双極子分極TSCなどでは，双極子数の増加は電流の大きさを変えるのみで，ピーク温度の移動には関係しないものと考えられるからである。



第13-5図 試料内の全イオン量qN_tを変えた場合のイオン空間電荷分極TSCの計算例

第13-6図はTSC測定時のコレクティング電圧

V_cを変えて計算した例である。同図よりV_cによりピーク温度T_mは大きく変化するが，それは試料内の電荷の移動はドリフトと拡散によっており，V_cにより電荷のドリフト速度が変わるためと考えられる。このような特性は，双極子分極のように試料内に凍結された双極子が緩和される過程で観測されるTSC電流では説明できないものであり，これも空間電荷分極TSCの一つの特徴と考えられる。従来より絶縁体のTSCを測定して，そのTSCを生じさせる原因を明らかにすることは，絶縁体材料の開発や材料の電気的特性を調べる上で重要な問題であるが，上記のコレクティング電圧を印加して測定するTSCの特性は空間電荷分極TSCを識別する手段として役立つと考えられる。次節では，絶縁膜中に過剰のNa^+イオンが存在することがあらかじめ知れているMIS（Al－SiO_2－Si）構造素子のTSCを測定し，上記の特性が得られることを示して数値計算と対比する。なお，第13－5，6図の計算条件は図に記された通りで，初期条件はV_bにおける飽和状態とした。



第13－6図　コレクティング電圧V_cを変えた時のイオン空間電荷分極TSCの計算例

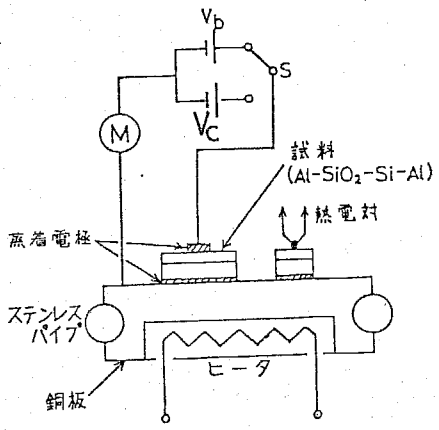
13－4　MIS試料のイオン空間電荷分極TSCの測定と物性定数の決定

<13－4－1>　試料および測定方法[98]

MIS素子を用いて絶縁膜中に含まれるNa^+イオンによるTSC測定を行なった。実験に用いた試料は熱酸化SiO_2膜で抵抗率6．5～9．5Ω・cmのシリコン（100）面を水蒸気を含む酸素中で酸化したものである。酸化温度は950°Cで，膜厚は1，000Åのものが用いられた。この膜の表面に

Alを蒸着し電極とした。電極の面積は約1.5mm²である。

試料は第13-7図のように液体窒素を通すパイプと加熱用のヒータを取付けた銅板上に固定される。測定は常に10^{-5}Torr程度の真空中で行なわれた。TSCの測定手順は次のとおりである。まず高温T_b(450°K)で温度を一定に保ち，バイアス電圧V_b(極性は金属電極に対するものとする。)を一定時間t_bだけ印加し，その後，電圧印加のまま室温まで急冷する。次に試料にコレクティング電圧V_cを印加した状態で温度を一定速度(約$\beta = 0.2$k/sec)で上昇させながらTSC電流を測定する。



第13-7図 測定装置と回路の略図

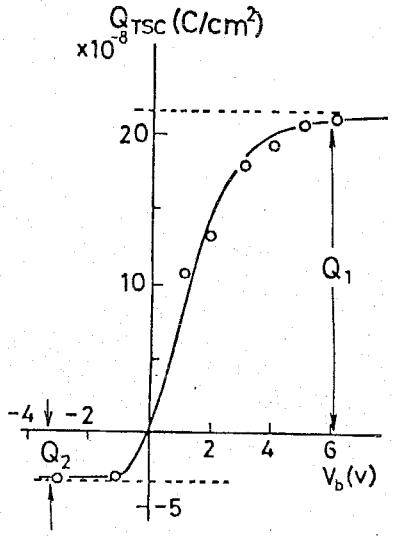
<13-4-2> 測定結果と物性定数の評価

本章でのTSC測定測定の目的はイオン空間電荷分極TSCの特徴を明確にし，試料の物性定数を求める点にある。そのためには，まず試料内に含まれる全イオン量およびホッピング距離を定めなければならない。そこで以下では，TSC測定結果と並行しながら順次説明していくことにする。

(a) 絶縁膜中の全イオン量

第13-5図に示したようにTSC曲線は試料内に含まれる全イオン量により変化する。本数値計算と対比するためにはこれを決定しなければならないが次のようにして求めた。すなわち，温度$T_b = 449$k，$t_b = 30$m:mとしてバイアス電圧V_bを種々変えた場合に，$V_c = 0$で観測されるTSCの面積計算を行ない，外部回路に流れた電荷量Q_{TSC}を算出して$V_b - Q_{TSC}$特性曲線を求める。第13-8図はその結果を示しているが，バイアス電圧V_bが正方向の飽和電荷量Q_1と負方向の飽和電荷量Q_2との和が全イオン量となる。同図より$q_0 N_t$として，2.5×10^{-7}C/cm²と求められた。なお，$t_b = 30$m:mとしたが，この時間では観測される電荷量は十分飽和してい

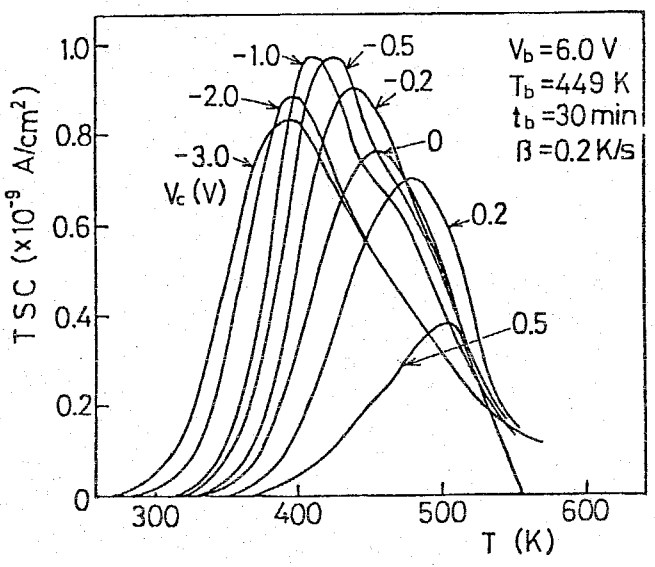
ることが確認されており，試料内での電荷分布は飽和状態となっていると考えられる。また，T_b = 449 K としたのは高温における電極界面での電荷の中性化現象の影響を除くためである。本実験では全イオン量をTSC測定値を用いて算出したが，C－V曲線（容量－電圧曲線）のフラットバンド電圧からも求めることができる。ところで，第13－8図からもわかるように $V_b - Q_{TSC}$ 特性は，V_b = 0 を中心として対称とはならず，およそ1V正電圧方向に移動している。この理由は，金属－半導体間の仕事関数差などのために印加電圧が零であっても絶縁体には等価的に電圧が加わり，正のイオンは金属側によっているためである。このことはC－V特性でもみられ，よく知られているが，以後述べる数値計算では実験結果と対比するためにこの効果を考慮している。



第13－8図　試料内の全イオン量 N_t を決定するための Q_{TSC} と V_b の関係

（b）TSC曲線のコレクティング電圧 V_c 依存性

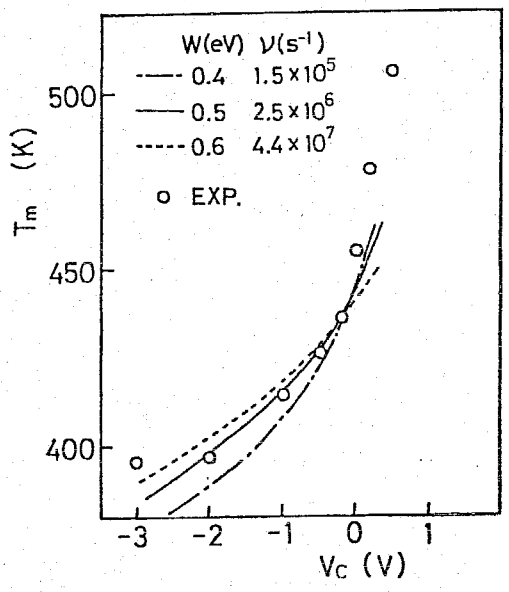
第13－6図で示したように，空間電荷分極TSCの特徴はコレクティング電圧 V_c により電流ピーク値及びピーク温度が変化する特性にあると考えられる。これを確認するためにバイアス電圧 V_b = 6 V，t_b = 30 min，T_b = 449 K として試料内に飽和状態の電荷分布を形成し，V_c を変化させてTSCの測定



第13－9図　TSC電流の V_c 依存性

を行なった。第13－9図はその結果を示しているが，V_c が小さくなる程ピーク温度 T_m は低温側に移行しており，第13－6図の数値計算と同様の傾向を示している。ただし，$V_c < -1V$ ではピーク温度は低温に移行するがピーク電流値は減少しており，数値計算とは異なる傾向を示している。この原因としては試料内に印加される電界が大きくなるとイオンが試料内を移動するだけでなく，界面に到達するときに中性化などの特殊な現象が起きていることが考えられる。[100] 以上のようにコレクティング電圧 V_c によりTSCピーク温度が変化する現象が実験からも確認された。

さて，第13－6，9図で同様の特性が得られることから，両者の特性を比較して試料の ν，W などの物性定数を評価することができる。そのためには第13－4図で説明したように，ν と W が決定するときピーク温度 T_m が定まるのであるから，実験で得られる $V_c - T_m$ 特性と計算で得られる同特性が一致するようにそれらの値を決めればよい。第14－10図はその結果を表わしているが，$\nu = 2.5 \times 10^6\ sec^{-1}$，$W = 0.5\ eV$ とするときに最もよい一致が得られた。ただし，数値計算は(a)項で求めた $qN_t = 2.5 \times 10^{-7}\ C/cm^2$ と $l = 10\ Å$ の値が用いられた。このうち l の値は(c)項で決定されたもので，このことは後に述べる。以上のようにして ν，l，W の値が知れたので，これより移動度や拡散定数を評価することができる。例えば，温度 $T_m = 450\ K$ における拡散定数 D および移動度 μ は次のようである。



第13－10図 W，ν を決定するための $V_c - T_m$ 特性

$$D = \nu l^2 \exp(-W/kT_m) = 6.36 \times 10^{-14}\ cm^2/sec$$

$$\mu = \frac{q}{kT}\nu l^2 \exp\left(-\frac{W}{kT_m}\right) = 1.64 \times 10^{-12}\ cm^2 \cdot V^{-1} \cdot sec^{-1} \quad \cdots\cdots (13-5)$$

(13-5)式で得られた値は他の研究者のものと比較して妥当であろう。

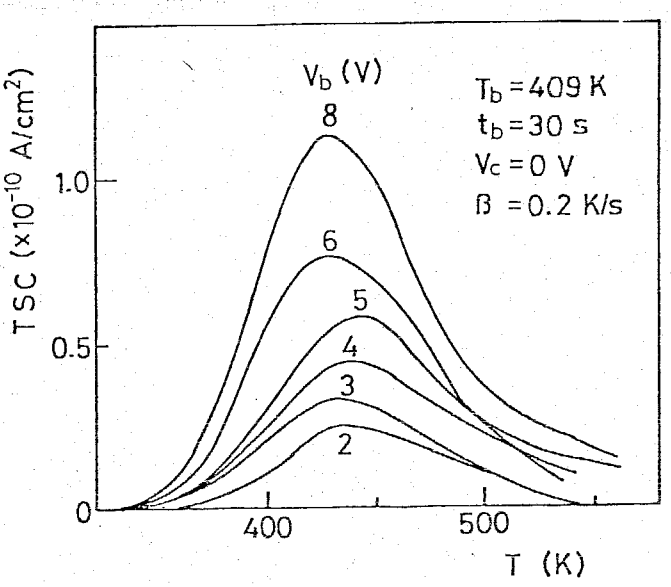
(c) ホッピング距離 l の決定

ホッピング距離 l の値は，数値解析や(13-5)式でも示したように移動度を評価する上で重要である。本章でのホッピング距離 l の決定には次の関係式が用いられた。(98)

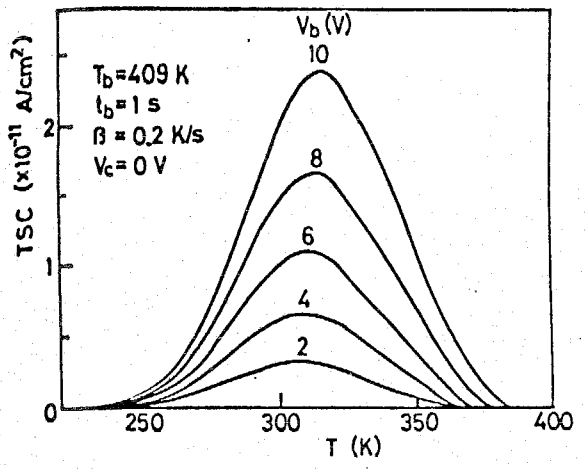
$$Q_{TSC} \propto \sinh\left(\frac{q l E_b}{2kT}\right) \quad \cdots\cdots (13-6)$$

ただし，E_b は試料に加わる平均電界で，V_b / d である。

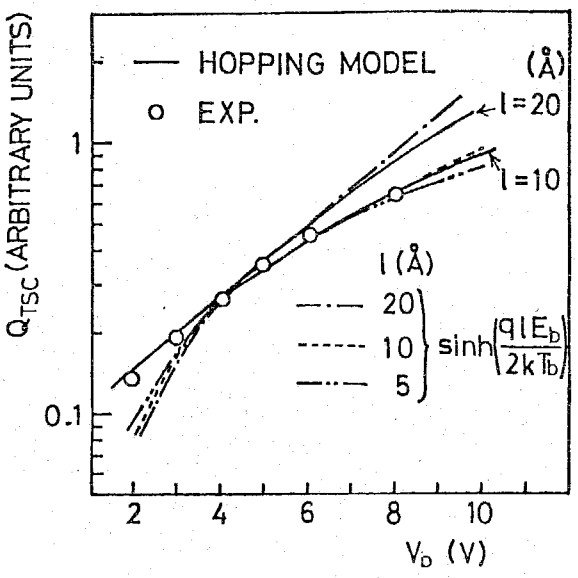
(13-6)式は，試料内でイオンの分布が寄っていないときに成立つものである。したがってTSC測定で l を決定するためには，バイアス時間 t_b が短かい状態すなわち不飽和状態における Q_{TSC} を求めればよい。第13-11図は $t_b = 30\ sec$ として測定されたTSCの測定結果を示している。TSC曲線はほぼ対称な形で，初期分布を飽和状態としたときに得られる第13-9図の特性や計算で得られる第13-2図とは異なっている。このことを更に確かめるために初期状態を不飽和としてTSCの曲線を数値解析を試みた。第13-12図はその結果で，第13-11図の実線結果とほぼ同じ曲線が得られていることがわかる。



第13-11図 バイアス時間 t_b (30 sec) が短かい場合のTSC



第13－12図　不飽和状態からのTSC曲線の計算例



第13－13図　ホッピング距離ℓを決定するための$Q_{TSC}-V_b$特性（○実験値）

さて，第13－11図の測定結果より$Q_{TSC}-V_b$の特性を求めたのが第13－13図である。同図よりℓ＝10Å程度とした場合に（13－6）式で記述される特性とよく一致していることがわかる。けれども（13－6）式は空間電荷電界の影響を無視した時に得られるもので，本章のように空間電荷電界が問題となる場合にも適用できるかどうか確かめる必要がある。そのためには第13－12図で示される不飽和状態からのQ_{TSC}の計算値を調べればよい。第13－13図には計算で得られた結果を実線で，（13－6）式より得られる結果を点線などで示したが，両者はよく一致していることがわかる。以上のことから，過剰イオンの存在する空間電荷が問題となる場合にも（13－6）式が近似的に成立するとみられることが確かめられ，ホッピング距離としてℓ＝10Åが得られた。前記（a）項では，すでにこの結果が用いられている。

13－5　イオン空間電荷分極TSCについての検討

＜13－5－1＞　双極子分極TSCとの比較

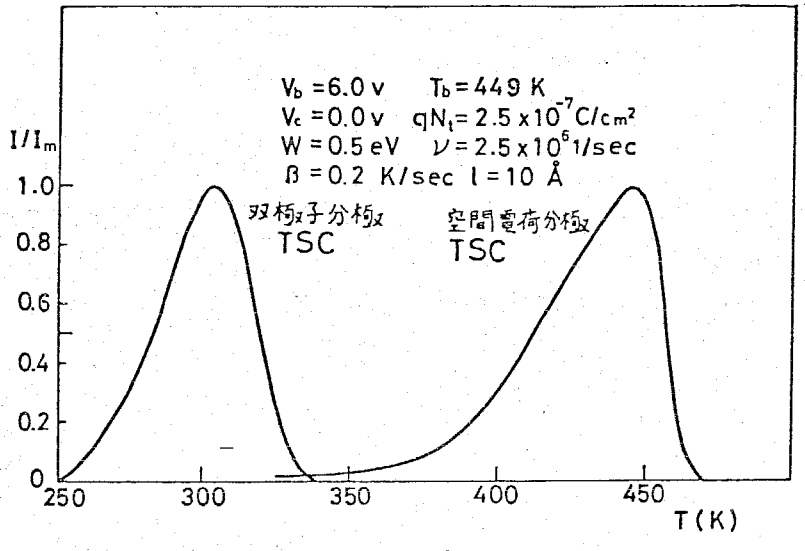
双極子分極によるＴＳＣについては今迄に多くの研究がなされ，単一緩和過程については解析式が導かれている。すなわち，

$$TSC = \frac{n\mu_p^2 E_b}{3kT_b\tau_0}\exp\left(-\frac{W}{kT}\right)\exp\left\{-\frac{1}{\beta\tau_0}\int_{T_0}^{T}\exp\left(-\frac{W}{kT'}\right)dT'\right\} \quad \cdots\cdots(13-7)$$

ただし，nは双極子の単位体積あたりの数，μ_pは双極子モーメントである。そして，双極子の緩和時間は次式で示される。

$$\tau = \tau_0\exp\left(\frac{W}{kT}\right) = \nu^{-1}\exp\left(\frac{W}{kT}\right) \quad \cdots\cdots(13-8)$$

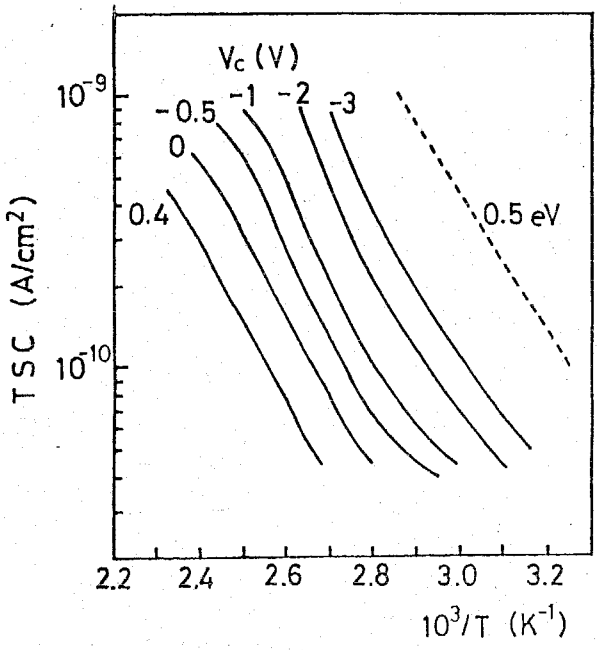
そこで，(13－8)式のν, Wに前節(b)項で得られた値を代入し，(13－7)式で計算されるＴＳＣを求め，空間電荷分極ＴＳＣとの比較を試みた。



第１３－１４図　イオン空間電荷分極ＴＳＣと双極子分極ＴＳＣの比較

第１３－１４図にその結果を示したが，同じν, Wの値を用いてもピーク温度T_mに大きなずれがあることがわかる。ただし，電流の大きさＩはピーク電流値I_mで規格化して示されている。この違いは，空間電荷分極ＴＳＣでは荷電粒子が試料内に連なるいくつかのポテンシャルの山を越えて遷移するのに対し，双極子分極ＴＳＣではＤｅｂｙｅ－ｍｏｄｅｌで示されるように一つのポテンシャルの山を通しての粒子の交換である点に原因があると考えられる。空間電荷分極が双極子分極とは異なる結果となることを，第９章の誘電分散現象や第５章の極性反転電流の解析においても述べている。従って，イオン空間電荷分

極TSCに対して双極子分極TSCの解析を適用することは大きな誤まりを起こす可能性があるものと考えられる。たとえば，従来よりTSCを測定し，その立ち上がり特性よりアレニウスプロットを求めて活性化エネルギーを決定し，その結果に（13－8）式を適用して周波数因子νを求めている。このことは後に述べるトラップによるTSCでも同様である。そこで，第13－15図に数値解析より得られる立ち上がり特性を整理した。同図より立ち上がり特性は直線とはならず曲線となっていることがわかる。従って，この特性より活性化エネルギーを求めることは必ずしも適切であるとは言い難く，およそのことしかわからないものと考えられる。

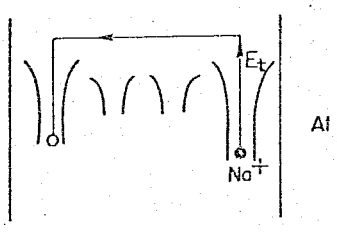


第13－15図　log TSC－T⁻¹特性（TSCの立ち上がり特性）

そこで，大雑把ではあるが第13－9図$V_c=0$の場合に立ち上がり特性より活性化エネルギーを求め，（13－8）式よりνを決定すると，それぞれ0.55eV，$\nu=1.38\times10^{3}\,sec^{-1}$となる。この結果は第13－10図で求めた値と比較すれば，νの評価に大きな誤差を生じていることがわかるであろう。

<13－5－2>　トラップモデルによるTSCとの比較[99]

MIS構造素子中のNa^{+}イオンによるTSCを説明する代表的なモデルは，第13－16図に示すように，Al，Si両界面付近にトラップがあるとするものである。そして，トラップ



第13－16図　Na^{+}のトラップモデル

より解放された電荷は SiO_2 膜中を即座に移動してもう一方のトラップに捕えられるとするもので，TSC電流はトラップからの電荷の解放過程に律速されると考えるものである。Hickmott氏はこのようなイオンのトラップモデルに対するTSCの解析として次式を導いた。

$$TSC = n_0 s \exp\left(-\frac{E_t}{kT}\right) \exp\left(\frac{S}{\beta}\right) \int_{T_0}^{T} \exp(-E_t/kT')\, dT' \quad \cdots\cdots (13-9)$$

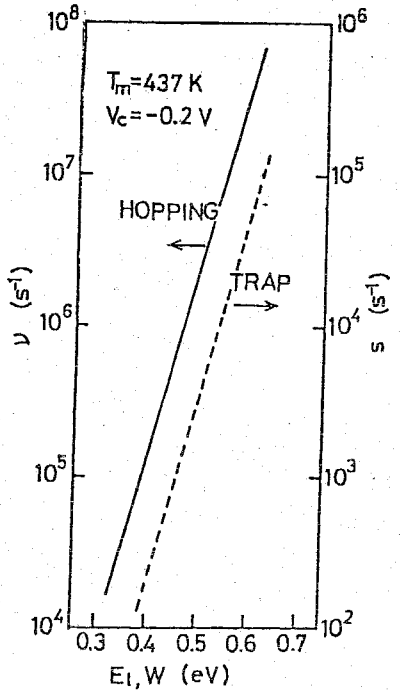
ここで，n_0 は初期トラップ電荷密度，S は周波数因子，E_t はトラップの深さである。

上記の（13－9）式は，形式的に（13－7）式の双極子の場合のTSCの式と同じである。このことは，前項で述べたことと同じ結果となることが予想される。たとえば，E_t と S，およびピーク温度 T_m の関係は（13－4）式と同様で，

$$\frac{\beta E_t}{kT_m^2} = s \exp(-E_t/kT_m) \quad \cdots\cdots (13-10)$$

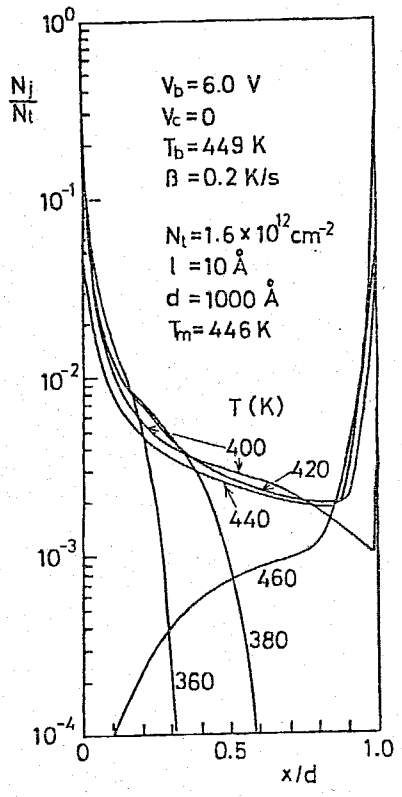
となる。この式よりピーク温度 $T_m = 437\,K$ となる場合の S と E_t の関係を求め，ホッピング数値計算法におけるそれらに対応する U と W の関係とを比較したのが第13－17図で，両者の間には大きな差異がある。従って，トラップモデルで解析する場合とホッピングモデルで解析する場合とでは物性定数の評価において大きな差を生じるものと考えられる。

さて，第4章でも述べたようにホッピング数値計算法では試料内の荷電粒子の挙動も外部回路に流れる電流との関係から明らかになる。第13－



第13－17図　ホッピングモデルとトラップモデルの比較

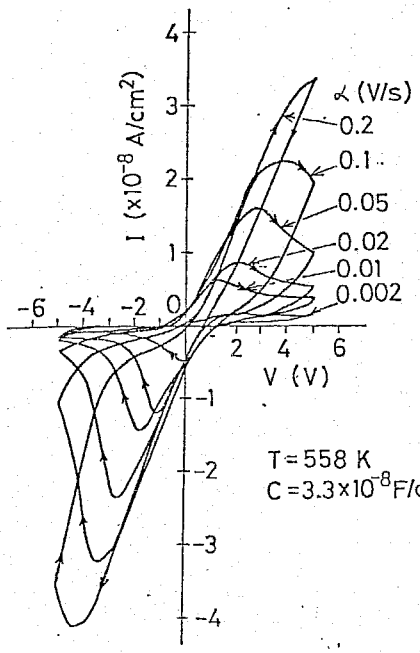
18図にその一例を示したが，この結果を示すTSCは第13－14図で記述されたものである。両図を対比すれば，電流ピーク値は荷電粒子の電荷分布の先端が一方の電極より他の電極に到達する温度付近で生じていることがわかる。この結果は過渡電流を解析した場合と同様である。ところで，荷電粒子の試料内での挙動という観点からみるならば，第13－18図で得られた結果は両電極付近で電荷の増加のみられる特性で，これは丁度，第13－16図のトラップモデルと同等とみることができ興味深い。このことは拡散，ドリフトというトラップとは全く異なるモデルでも十分に同じ結果となり得ることを意味している。ところで，ホッピングモデルはトラップの効果も拡散やドリフトの効果と共に取り入れて解析できるのであるから，絶縁膜中の電荷の挙動についての知見を得る上で役立つものと考えられる。



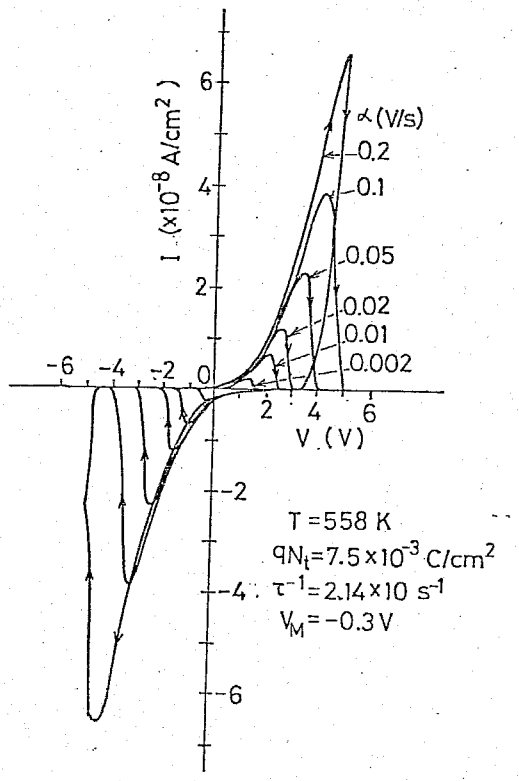
第13－18図　試料内の荷電粒子の挙動

13－6　ランプ電圧印加によるMIS過渡電流特性[101],[102]

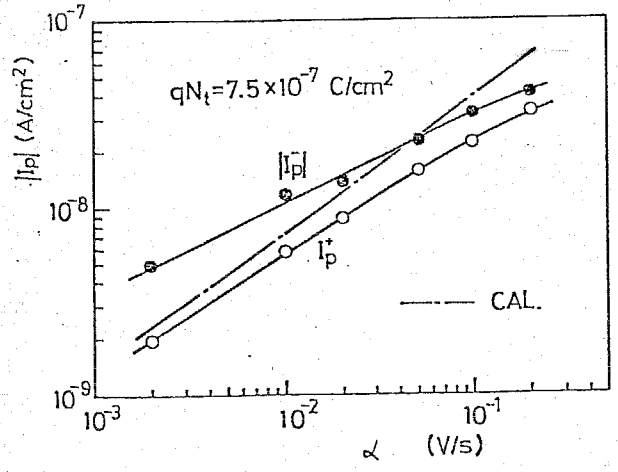
MIS絶縁膜中の可動イオンの挙動を調べるためランプ電圧を印加し，その過渡電流測定を測定することでも研究が進められている。第13－19図はランプ電圧α(V/sec)を変えた場合に得られる実測電流波形を示している。ただし，同図では試料の容量Cによる充電々流$C\,dV/dt = C\alpha$は実測データより除去してある。同図より電流は極めて複雑な挙動をしていることがわかる。このような実験に対してもホッピング数値計算法を適用できることは第4章5節で述べている。この数値計算を行なった結果を第13－20図に示す。この電流特性は試料内に含まれる電荷量に依存するため，逆にこれを利用して



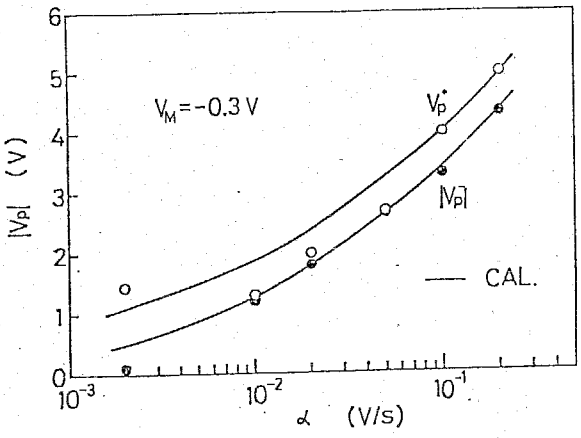
第13－19図　ランプ電圧印加測定による電流波形



第13－20図　ランプ電圧印加に対する電流波形の計算値



第13－21図　α－I_p 特性
（実験値と計算値の比較）



第13－22図　α－V_p 特性
（実験値と計算値の比較）

電荷量を評価したり，また，計算は$t/\nu\exp(-W/kT)$で規格化して行なうため，αに対するピーク電流の発生電圧を合わせることにより緩和時間τすなわち$\nu\exp(-W/kT)$を求められる。第8－21図はαに対してピーク電流値を実験と計算で合わせたものである。計算では$qN_t = 7.5\times10^{-7}\,C/cm^2$としたときにほぼ実験の値と同じになった。この値は第13－8図のQ_{TSC}より求めたものと比較するとほぼ3倍となったが，この原因は種々考えられようが現在不明である。また実験では正電圧方向に昇圧した場合と負電圧方向に降圧した場合とで，同図にI_p^+，I_p^-で示すようにピーク電流値に差異がみられるが，この原因は，試料内での電荷の挙動は拡散とドリフトのみならず界面現象（トラップなど）が関与しているとみられる。第8－22図はαに対するピーク電流値を発生する時の電圧をプロットしたものである。既に述べたようにMIS試料では電圧に対し非対称性となることは明らかであるが，実測ではほぼ0.3Vのずれがみられた。計算も同図に，この分を考慮して示したが得られる特性はほぼ一致している。そして，この特性曲線を比較すればτが定められるが第8－20図中にも示したが，$\tau^{-1} = 21.4\,s^{-1}$とするときにより一致が得られた。なお，第8－20図の結果は実験特性とほぼ一致する場合のもので示してある。

以上のようにランプ電圧の測定で，αを変化した時に得られる$\alpha-V_p$，$\alpha-I_p$特性から試料の特性すなわち物性定数が評価されると考えられるが，これらの結果はTSC測定の結果とは完全には一致しない。しかし，ランプ電圧の測定は容易であるので，今後TSC測定と共に用いれば，試料内のイオンの挙動についてさらに詳しい情報が得られよう。

13－7. まとめ

本章ではホッピング数値計算法を空間電荷分極TSCの解析に適用して，コレクティング電圧V_cによりTSCピーク温度が変化するなどの現象を明らかにした。そして，この結果をもとにMIS素子のTSC測定を行ない，同特性

の得られること，またこれを利用して試料についての拡散定数などが評価できることも示した。またさらに，双極子分極ＴＳＣやトラップによるＴＳＣとの比較も行なって，空間電荷分極ＴＳＣの特徴を明らかにした。最後に，ランプ電圧に対する電流特性の解析についても触れた。

第14章　MIS構造素子の空乏層電界解析へのホッピング数値計算法の応用

14-1　まえがき[20],[103]

現在，最も広く使用されている集積回路技術は，シリコン単結晶を基板材料としたモノリシック半導体集積回路技術で，その基本は1959年にFair・child社より発表されたプレーナ型トランジスタである。このトランジスタの発明以来約20年間に，半導体集積回路技術は長足の進歩をとげ，現在では1チップあたりの集積規模が数十万個にも及ぶ素子を集積するVLSI（very large scale integration）～超LSIの実現も間近になっている。[20] こうした集積回路は，構成する部品がバイポーラであるかMOSトランジスタであるかにより，それぞれバイポーラトランジスタ集積回路，あるいはMOS集積回路に分類されるが，断面構造から調べてゆくと両者ともにp・n接合とMIS（金属－絶縁体－半導体）構造が基本となっていることがわかる。そして，P・n接合とMIS構造に関する物理的なメカニズムの理論解析や定量的に素子の諸特性を評価して再現や予測のできるようなモデルの作成が，上記VLSIの実現及び素子に関する物理的な知見を得る上で重要である。

このような観点から，従来より半導体の電導現象を記述する微分方程式を理論解析しようとする試みがなされてきた。しかし，これらの方程式を解析的に扱かうことは基本的に困難である。そのため初期段階では，一部近似して純解析的な手法によって行なおうとする試みがなされた。例えば，MOS構造素子の空乏層電界計算は表面層における電荷密度に対してボルツマン分布を仮定してポアソンの式のみで扱かわれている。[103] しかし，純解析的な方法では得られる結果は簡単な公式で示されるためにわかりやすいが，数多くの近似を導入するために正確さは保証できない場合が多い。そして，近似がデバイスの本質的な特性に影響を与えるような場合には，もはやデバイス設計などに使用すること

はできないであろう。例えばMOSトランジスタのI-V(ドレイン電流-印加電圧)特性は，電圧の高い領域ではドリフト電流のみで近似する，いわゆるgradual modelで十分であろうが，[104]低い領域では拡散の寄与が大きくなり，もはやこのモデルでは十分でない。[104]-[108]そして，デバイスの低パワー化や集積度の上昇に伴なうscale則からの低電圧への移行の状況を考えれば，デバイス設計でこの問題はさらに重要となる。[20]

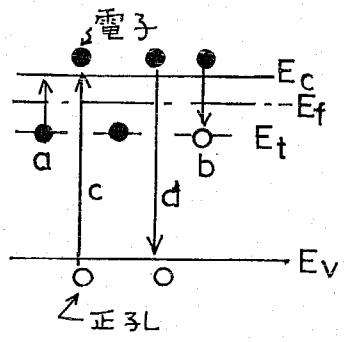
このような立場から現在では電算機の発達に伴なって，現象を記述する方程式をそのまま数値解析しようとする試みが各所で行なわれるようになってきた。この方法によれば，任意の不純物濃度分布に対して扱かいが可能であるなど，実際のデバイスにより近い条件のもとで解析することができる。そして，微分方程式で記述される電導現象を表わす基本方程式を，指定された境界条件のもとでいかに数値解析するかということがこの種の研究の焦点になる。従って，取扱いはきわめて数式的となり，対象とする現象が直観的にとらえにくいものとなるきらいがある。しかしながら今迄に上記の微分方程式を解くという努力の結果から，デバイスや半導体についての数多くの知見が得られている。さらに最近では，二次元に対する扱かいも可能となってきた。[109]

本章では上記の点を考慮して，半導体電導現象に対する微分方程式を解くという立場から，現象をより直観的にとらえることを目的としてホッピング数値計算法との関連性を述べ，この方法の適用を試みる。その結果，半導体電導現象に対してもホッピング数値計算法を用いればより直観的に現象が取扱えることなどを述べる。さらに，これをもとにしてMIS構造素子の空乏層電界計算を行なう。計算例はデバイス解析としては最も初歩のものと考えられようが，多くの重要な問題を含んでおり，P-n接合やトランジスタなどもっと複雑なものに応用する際の基本となる。

14-2 半導体電導現象に対する基本方程式[103],[110]-[112]

本章ではn型半導体の場合を述べるが，P型半導体の場合も同様に扱かえる。

n型半導体のエネルギーバンド図を第14－1図に示す。ここでE_cは伝導帯の下端，E_fはフェルミ準位，E_tはトラップ準位，この場合トラップされた電子を放出して正にイオン化されるのでドナー準位と呼ばれる。E_vは価電子帯の上端である。第14－1図を用いて半導体をキャリアの挙動から考えてみると，図中，a，b，c，dで示される4つの素過程からなることがわかる。aはドナー準位にトラップされている電子が伝導帯に励起されてドナー準位が正にイオン化される過程，bは伝導帯の電子が空のドナー準位にトラップされる過程，cは伝導帯と価電子帯の間で正（正孔）と負（電子）のキャリア対が発生する過程，dは伝導帯の電子と価電子帯の正孔との再結合により正負キャリア対が消滅する過程である。



第14－1図　n型半導体のエネルギーバンド図

このような4つの素過程からなるn型半導帯について，キャリアの電導を記述する基本方程式を作成すれば，nを伝導帯の電子密度，pを価電子帯の正孔密度，n_tをドナー準位におけるトラップされた電子密度，n_Dをドナー準位のトラップ密度として次のようである。

$$\begin{cases} \dfrac{\partial n}{\partial t} = -\dfrac{\partial J_n}{\partial x} + \alpha n_t - \beta n(n_D - n_t) + \gamma - \delta pn & \cdots\cdots (14-1) \\ \dfrac{\partial p}{\partial t} = -\dfrac{\partial J_p}{\partial x} + \gamma - \delta pn & \cdots\cdots (14-2) \\ \dfrac{\partial n_D}{\partial t} = -\alpha n_t + \beta n(n_D - n_t) & \cdots\cdots (14-3) \end{cases}$$

ただし，αはドナー準位からの電子の発生率，βは伝導帯とドナー準位間の再結合係数，γは伝導帯と価電子帯の間の正（正孔）と負（電子）のキャリアの

発生率，δはそれらが再結合によって消滅する際の再結合係数である。そして，J_n，J_pはそれぞれ伝導帯を流れる電子電流，価電子帯を流れる正孔電流を表わし，拡散定数をD_n，D_p，移動度をμ_n，μ_pとして次のようである。

$$J_n = eD_n \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} + e\mu_n n E \quad \cdots\cdots (14-4)$$

$$J_p = -eD_p \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + e\mu_p p E \quad \cdots\cdots (14-5)$$

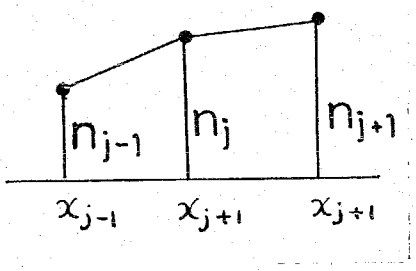
ただし，Eは電界で，ポアソンの式を満たすとして

$$\frac{dE}{dx} = \frac{e}{\varepsilon}(p - n + n_D) \quad \cdots\cdots (14-6)$$

以上，(14-1)～(14-6)式で与えられる基本方程式が電導現象を扱かうための基本式である。

14-3 電導現象に対する基本方程式とホッピング方程式の関係[20]

(14-1)～(14-6)式さ解けば半導体の電導現象を解析することができるが，「まえがき」にも述べたようにこれらさ解析的に扱かうことは困難である。そのため数値解析するわけであるが，まず最初に(14-1)～(14-6)式をそのまま差分式で近似して行なう方法が考えられる。差分近似とは第14-2図に示されるように，各位置における電荷密度n_j(正孔の場合はP_j)さ線形近似する方法である。しかし，この方法により定常問題さ扱かうと電圧が大きくなる場合に計算が不安定となることが知られている。

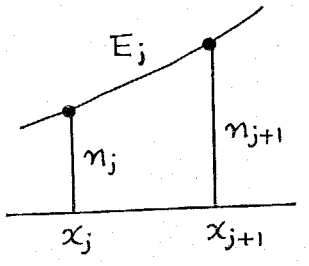


第14-2図 差分近似の説明図

Gummel氏はこのような問題に対し，第14-3図で示すように，微小区間δx($= x_{j+1} - x_j$)の区間で電界さ一定として，(14-4)式を境界条件$x = x_j$で$n = n_j$，$x = x_{j+1}$で$n = n_{j+1}$のもとで解き，

これから得られる基本式を用いれば安定な数値解析が行なえることを示した。すなわち，（14－4）式を解けば，D_n と μ_n の間のアインシュタインの関係を用いて，

$$J_n = \frac{e\mu_n E_j}{\exp\left(\frac{E\cdot\delta x}{kT}\right)-1}\cdot$$



第14－3図 Gummel氏の近似法の説明図

$$\times\left(n_j \exp\left(\frac{E_j\cdot\delta x}{kT}\right)-n_{j+1}\right) \quad \cdots\cdots (14-7)$$

となるが，この（14－7）式を上記の基本方程式に代入してゆくことにより問題を扱かったわけである。この方法は，（14－4）式の微分方程式を解いて解析するので一般には積分近似と呼ばれ，定定な数値計算法として注目されている。そこで，ホッピング数値計算法と（14－7）式の関連性を考えてみよう。まず，（14－7）式は次のように変形されることは容易にわかる。

$$J_n = \left\{\frac{eD_n/\delta x^2}{\frac{\sinh(E\cdot\delta x/2kT)}{E\cdot\delta x/2kT}}\right\}\left(\rho_j\delta x\, e^{\frac{E_j\cdot\delta x}{2kT}} - \rho_{j+1}\delta x\, e^{-\frac{E_j\cdot\delta x}{2kT}}\right)\cdot$$

$\cdots\cdots (14-8)$

$$J_n = \left\{\frac{eD_n/\delta x^2}{\frac{\sinh(E_j\cdot\delta x/2kT)}{E_j\cdot\delta x/2kT}}\right\}\left(N_j\, e^{\frac{E_j\cdot\delta x}{2kT}} - N_{j+1}\, e^{-\frac{E_j\cdot\delta x}{2kT}}\right)$$

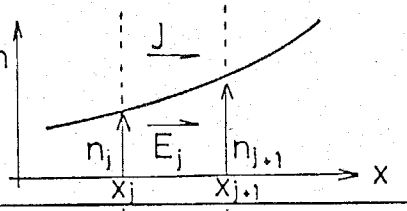
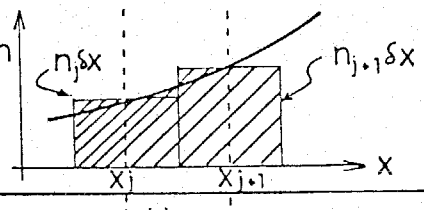
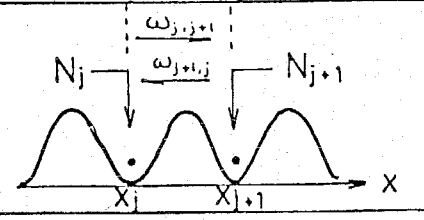
$\cdots\cdots (14-9)$

（14－8）式は x_j と x_{j+1} の位置における電荷密度の関係を表わす差分式であるが，$\rho_j\cdot\delta x = N_j$，$\rho_{j+1}\,\delta x = N_{j+1}$ とみる（14－9）式では δx の区間に電荷密度一定で，その総量が N_j，N_{j+1} である電荷数と電荷数の関係を表わしていると考えることができる。そして，（14－9）式におい

て, $\omega_{j,j+1}$, $\omega_{j+1,j}$ を

$$\left.\begin{aligned}\omega_{j,j+1} &= \frac{eD_n/\delta x^2}{\dfrac{\sinh(E_j\cdot\delta x/2kT)}{E_j\cdot\delta x/2kT}}\, e^{\frac{E_j\cdot\delta x}{2kT}}\\ \omega_{j+1,j} &= \frac{eD_n/\delta x^2}{\dfrac{\sinh(E_j\cdot\delta x/2kT)}{E_j\cdot\delta x/2kT}}\, e^{-\frac{E_j\cdot\delta x}{2kT}}\end{aligned}\right\} \quad \cdots\cdots (14-10)$$

とみるならば, これらはそれぞれ x_j から x_{j+1}, x_{j+1} から x_j への電荷の遷移確率とみることができる。以上の関係を第14－4図を用いて説明しよう。

	説明図	電流の基本式
a		$J=\left\{\dfrac{eD_n/\delta x^2}{\dfrac{\sinh(E_j\delta x/2kT)}{E_j\delta x/2kT}}\right\}\cdot\left\{n_j\delta x\exp\left(\dfrac{E_j\delta x}{2kT}\right)-n_{j+1}\exp\left(-\dfrac{E_j\delta x}{2kT}\right)\right\}$
b		$J=\left\{\dfrac{eD_n/\delta x^2}{\dfrac{\sinh(E_j\delta x/2kT)}{E_j\delta x/2kT}}\right\}\cdot\left\{N_j\exp\left(\dfrac{E_j\delta x}{2kT}\right)-N_{j+1}\exp\left(-\dfrac{E_j\delta x}{2kT}\right)\right\}$
c		$J=e(\omega_{j,j+1}N_j-\omega_{j+1,j}N_{j+1})$

第14－4図　電導現象に対する電流の基本式とホッピング数値計算法の基本式の関係

第14－4図(a)は解くべき試料内の電荷分布の様子を表わしており, その場合にGummel氏の積分近似によって得られる電流の式が右欄に書かれている。そして(b)図では, この近似が実質上 x_j, x_{j+1} を中心に δx の

区間内に一定の電荷密度 n_j , n_{j+1} で分布していると考えることと等価であることを示している。その場合，この意味を表現するため $n_j \delta x = N_j$, $n_{j+1} \delta x = N_{j+1}$ として置き換えている。そして（c）図は，（14－10）式のように係数を考えるならば，それはさらに x_j , x_{j+1} の点における電荷 N_j , N_{j+1} がこの間で遷移して動くことと等価であることを示している。ここで注意すべきことは，（a），（b）の段階では，x_j , x_{j+1} で示される点における電荷密度と電流の関係という数式的な意味しかないが，（c）の段階では，電荷の遷移という物理的なイメージが入ってくるということである。そして，さらには一点の電荷密度という概念から δx という区間の電荷の挙動という考え方に転換しているということである。従って，（14－7）式を用いることは，x_j , x_{j+1} を中心として δx の区間内の領域に均一な電荷があるとして，それらが $\omega_{j,j+1}$, $\omega_{j+1,j}$ の遷移確率で隣接する領域に遷移するモデルによって考え直すことができることを意味している。ここで（14－10）式に対して説明を付け加えるならば，$|E \cdot \delta x / 2kT| < 1$ の場合には，

$$\left.\begin{aligned} \omega_{j,j+1} &\fallingdotseq \frac{e D_n}{\delta x_j^2} \exp\left(\frac{E_j \cdot \delta x_j}{2kT}\right) \\ \omega_{j+1,j} &\fallingdotseq \frac{e D_n}{\delta x_j^2} \exp\left(-\frac{E_j \cdot \delta x_j}{2kT}\right) \end{aligned}\right\} \cdots (14-11)$$

によって近似できる。すなわち，区切した領域間の電位差が小さい場合には，電子伝導現象を解析するために導いたホッピング数値計算法の関係式と一致する。以上のことから，一次元では半導体電導現象を表わす微分方程式を積分近似で解くという手段に，電荷の遷移という物理的な意味を付加することによって，ホッピング数値計算法と関連性がでてくることが明らかとなった。そして，二次元，三次元となった場合には領域間における電荷の遷移という現象的な見方から展開することは，遷移確率を表わす因子で領域を接続してゆくのみであるから，その扱かいは容易である。また，今迄の展開から，差分近似という立

場からみれば，ホッピング数値計算法は積分近似と関連してきわめて安定性のよい数値計算であることも理解されよう。

14－4　ホッピング数値計算法における基本方程式の作成

今迄に述べたことを基盤として，半導体電導現象に対するホッピング数値計算法の基本方程式を作成すれば，（14－1）～（14－3）式は，

$$\begin{cases} \dfrac{dN_j}{dt} = \omega_{j-1,j}N_{j-1} - (\omega_{j,j-1}+\omega_{j,j+1})N_j + \omega_{j+1,j}N_{j+1} \\ \qquad\qquad + \alpha N_{tj} - \beta N_j(N_{Dj}-N_{tj}) + (\gamma\delta x_j^2 - \delta P_j N_j)/\delta x_j \\ \qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad \cdots\cdots(14-11) \\ \dfrac{dP_j}{dt} = a\omega_{j-1,j}^{-1}P_{j-1} - a(\omega_{j,j-1}^{-1}+\omega_{j,j+1}^{-1})P_j + a\omega_{j+1,j}^{-1}P_{j+1} \\ \qquad\qquad + (\gamma\delta x_j^2 - \delta P_j N_j)/\delta x_j \qquad \cdots(14-12) \\ \dfrac{dN_{tj}}{dt} = -\alpha N_{tj} + \beta N_j(N_{Dj}-N_{tj}) \qquad \cdots(14-13) \end{cases}$$

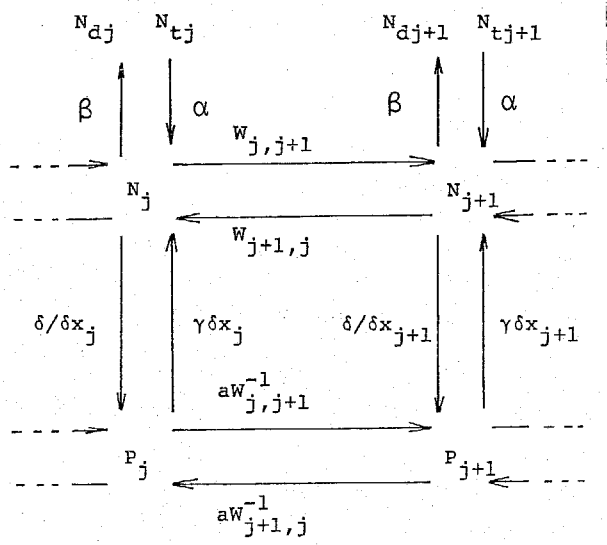
となる。ただし，$a=\mu_p/\mu_n=D_p/D_n$とする。また，n_jなどの電子密度をN_jと大文字を用いて表わしたのは，それが区間δx_jに含まれる全電荷数$N_j=n_j\delta x_j$を意味しているからである。ここでδx_jで示した理由は，分割の仕方が一様でない場合も含めて一般化したことによっている。さらに，（14－6）式で示されるポアソンの式は，

$$E_j = \frac{e}{\varepsilon}(P_j - N_j + N_{Dj}) + E_{j-1} \qquad \cdots\cdots(14-14)$$

となる。

上記，（14－11）～（14－13）式を用いれば半導体の電導現象を扱かえることになるが，その場合の電荷の挙動を表わす素過程を等価モデルで記

述してみよう。その結果は，第14－5図のように図示されるであろう。

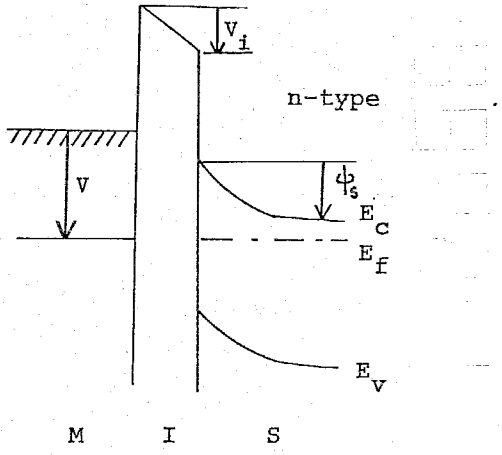


第14－5図
半導体電導現象に対する
等価回路

上記，第14－5図については次の点に注意する必要がある。すなわち，N_j と N_{j+1}（P_j と P_{j+1} も同様）は空間的に異なる位置を示しているが，それらは確率因子により結ばれている。一方，空間的には同じ位置にある N_j と P_j（N_{j+1} と P_{j+1} も同様）の間もまた，δ，γ などのある種の確率因子によって結ばれている。以上のことは，空間的な電荷の移動も，電子と正孔間の電荷の移動も電荷の遷移という観点からは同質とみることができることを意味している。これは現象的にみて極めて自然である。そして，数値解析ではこの性質を取り入れることは重要である。

14－5．MIS構造素子中の空乏層電界の解析

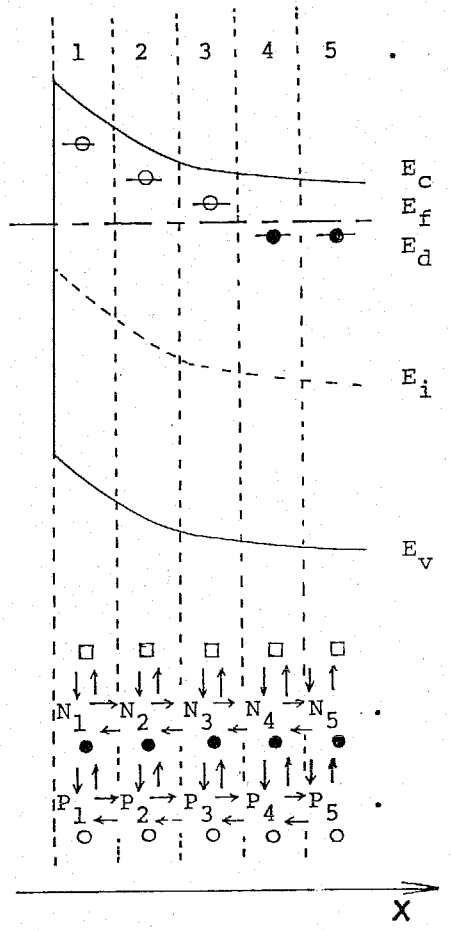
この節では，前節までに得られた結果をもとにしてMIS構造素子中の空乏層電界計算をホッピング数値計算法を用いて行なう。ただし，MIS構造素子としては理想状態の場合を扱うことにする。



第14－6図　MIS構造エネルギーバンド図

第14－6図は金属側に半導体側よりVの電圧を印加した場合のエネルギーバンド図を示す。同図に示されるように，印加電圧は絶縁体と半導体（n型）側に分けられることがわかるが，本章では図中の半導体に加わる電圧ψ_sと半導体表面に誘起される電荷Q_sの関係が研究の対象となる。

第14－7図は第14－6図を更に詳しく半導体側のみ図解したもので，ホッピング数値計算法を適用するための領域分けとその内部における電子，正孔などの電荷の交換の様子を表わす等価モデルも示されている。そして，等価モデルで示された電荷の挙動を方程式で記せば，それらは（14－11）～（14－13）の基本式及び（14－14）で記述されるポアソンの式で表現される。ただし，図に示されたように，1の位置では絶縁体側からの電荷の移動はない。この条件は，基本式においては，$\omega_{0,1}=\omega_{1,0}=0$と置くことにより組み込まれる。



第14－7図　ホッピング数値計算法を適用するための領域分け

本節では定常状態を扱かうので，上述の基本式より解析に必要な諸関係式を導こう。まず，定常状態であるから（14－11）～（14－13）式で示される左辺の時間項を零とする。そして，境界条件として，第14－7図の領域1における電荷が，絶縁体領域と電荷の交換を行なわないとする条件$\omega_{0,1}=0$，$\omega_{1,0}=0$を代入する。さらに，定常状態では，伝導帯の電子と価電子帯の正孔の電荷の交換，およびドナー準位にトラップされている電子と伝導帯中の電子との電荷の交換はつり合いの状態にあると考えられ

るので，これらの条件も代入する。その結果，定常状態においては以下の関係式が成立することが容易にわかる。

$$\gamma \delta x_j = \delta P_j \cdot N_j \quad \cdots\cdots (14-15)$$

$$\alpha N_{tj} = \beta N_j \cdot (N_{Dj} - N_{tj}) \quad \cdots (14-16)$$

$$\omega_{j,j+1} N_j = \omega_{j+1,j} N_{j+1} \quad \cdots\cdots (14-17)$$

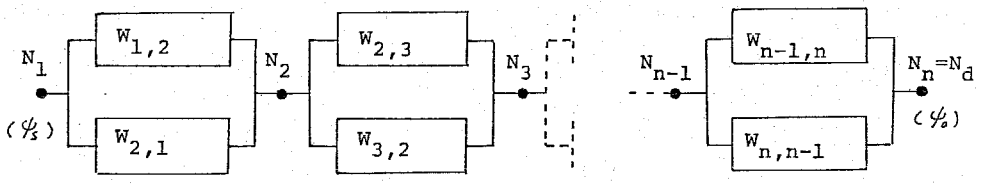
$$\omega^{-1}_{j,j+1} P_j = \omega^{-1}_{j+1,j} P_{j+1} \quad \cdots\cdots (14-18)$$

そして，ψ_s の条件としては，E_j を x_j と x_{j+1} の間の電界として，

$$\psi_s = -\sum_{j=1}^{n} E_j \cdot \delta x \quad \cdots\cdots (14-19)$$

が成立する。ただし，この ψ_s は $E_n = 0$ となるようなれまで加えると言う意味で，E_j は（14－14）式で示されるポアソンの式を満たしている。

さて，（14－15）～（14－19）式で示される関係式より，ホッピング数値計算法を用いるための等価回路を作成しよう。第14－8図は，その結果を示している。



第14－8図　半導体空乏層電界解析のための等価回路

従って，以上述べてきた定常解析の問題は，第14－8図で記述される等価回路を解析する問題に帰着されたことになる。

次節では実際の解析例を示すが，その前に（14－17）式の意味を考えておこう。（14－9），（14－10）式からもわかるように，x_j から x_{j+1} へ流れる電子電流 J_n（（14－18）式から導かれる正孔電流 J_p についても同様）は，次式で示される。

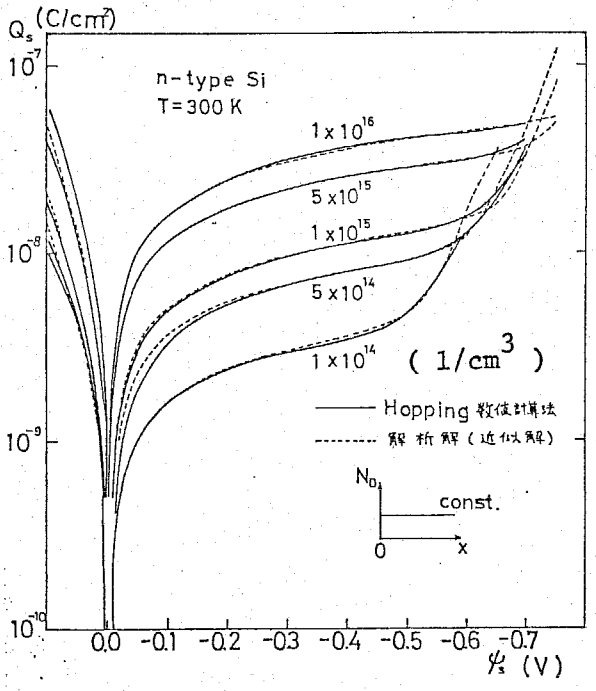
$$J_n = e(\omega_{j,j+1} N_j - \omega_{j+1,j} N_{j+1})$$

・・・・・（14－20）

ここで，（14－17）式が成立する場合には$J_n = 0$となる。このことは電子電流が流れないことを意味していて，つり合いの条件としては自然である。さらに，（14－20）式には拡散と空間電荷電界によるドリフトの効果が含まれていることは今迄に各所で述べてきた通りである。

14－6　空乏層電界の解析例[110]~[112]

前節までに得られた（14－14）～（14－19）の関係式を用いて行なった数値解析例を以下に示す。第14－9図は，半導体中に含まれる不純物濃度を一定として数値計算を行なった結果である。同図中，実線はホッピング数値計算法による結果で，点線が従来より表面層における電荷密度にボルツマン分布を仮定して，ポアソンの式のみで理論解析した結果である。両者は各領域で一致しているが，$\psi_s > 0$の範囲での蓄積層，ψ_sが負の領域で大きな値をとる場合の反転層領域で若干の差がみられている。この差は，計算誤差によるものとも考えられようが，ホッピング数値計算法では拡散の効果が入っているが，従来の理論計算ではこの効果が入っていないためとも考えられる。すなわち，反転層領域や蓄積層領域ではキャリアが表面にかなり集まっていると考えられるからで，そのため拡散の効果を無視することはこの領域に対する理論計算に大きな影響を与えるとみられる。一方，空乏層領域では電荷の蓄積もないのでこのような影響はみられない。



第14－9図　不純物濃度が一定である場合の数値計算例

以上のように理論解析では拡散の効果を取入れて計算できないが，数値解析においてはこのことは容易である。そして，数値計算によって現実の試料の特性を十分に表わすことができるものと期待される。なお，第14－9図における理論解析によるQ_Sとψ_Sの関係を表わす式は次のようである。

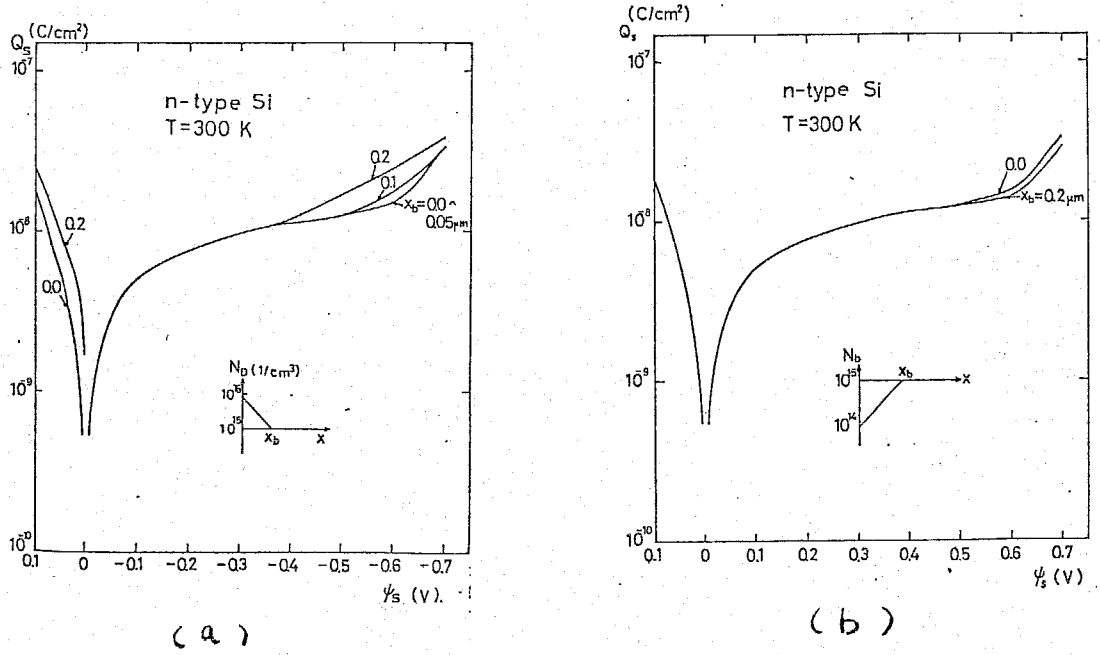
$$Q_S = \pm \frac{2\varepsilon_S kT}{qL_D} F\left(\beta\psi_S, \frac{P_{no}}{n_{no}}\right) \qquad \cdots\cdots (14-21)$$

ただし，

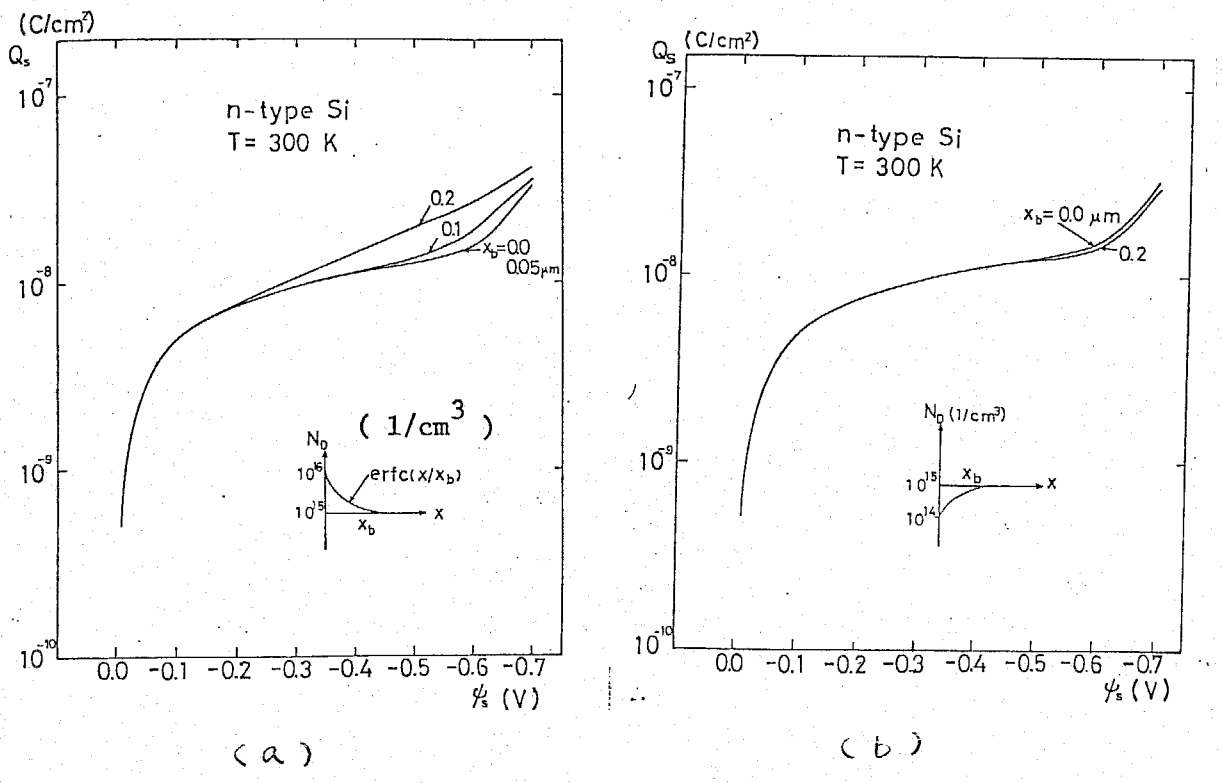
$$F\left(\beta\psi_S, \frac{P_{no}}{n_{no}}\right) \equiv \left\{ \frac{P_{no}}{n_{no}} \left(e^{-\beta\psi_S} + \beta\psi_S - 1 \right) + \left(e^{\beta\psi_S} - \beta\psi_S - 1 \right) \right\}^{\frac{1}{2}}$$

$$L_D = \sqrt{\frac{2\varepsilon_S}{q n_{no} \beta}} \quad , \quad \beta = \frac{q}{kT}$$

である。また，n_{no}，P_{no}は各々結晶内部での電子および正孔密度である。上述したように理論解析の結果は（14－21）式のようになるが，この結果はキャリアの拡散を無視した時に得られるものであることに再度注意しておこう。



第14－10図　不純物濃度分布を変えた場合の計算例



第14－11図　不純物濃度分布を変えた場合の計算例

第14－10，11図はいずれも第14－9図に対して，半導体中における不純物濃度分布を仮定した場合の解析例である。図中には計算に用いられた濃度分布が示されている。従来，この種の分布のある場合を純解析的に求めることは境界条件の難かしさがあり極めて困難であった。しかしながら，ホッピング数値計算法によれば不純物の分布にかかわらず統一的に扱うことができる。それは，不純物分布の相違は，第14－8図の等価回路に実質的な変化をもたらすものではなく，全体からみた場合の各素子 $\omega_{j,j\pm1}$ の特性に対して，ポアソンの式で定まる空間電荷電界の影響として若干の変化を与えるのみであるからである。そして，半導体プロセス技術の進歩や集積回路技術の向上に伴ないこれらの数値解析が行なえることの重要性は増すと考えられるが，ホッピング数値計算法は第12章でも述べたように二次元の扱かいも容易であり，有効にこのような問題に対処できると思われる。上記に掲げた例はその一例であるが

その他の濃度分布や二次元となった場合も同様に扱かえる。

14-7 まとめ.

本章では，半導体電導現象を記述する微分方程式を解くという立場から，まずホッピング数値計算法との関連性を述べた。すなわち，一次元においては，電導現象を表わす微分方程式を積分近似で解くという方法に，電荷の遷移という物理的な意味を付加することによりいわゆる差分方程式に対してホッピング数値計算法という考え方が生ずることを示した。そして，この方法により半導体電導現象の記述及び等価回路モデルを示し，MOS空乏層中の電界解析に拡散の効果を組み入れて適用できることを明らかにした。

本章では，デバイスとしては最も単純な場合を扱かったが，p-n接合素子や二次元デバイスの解析が行なえることは同様であろう。また，デバイスにおける周波数特性の問題はその応用を考えるとき重要であるが，それには第9，11章の結果を利用できるであろう。また，スイッチング特性などの過渡の問題も，第3，8章から考えて容易に行なえるであろう。

第 15 章　熱刺激表面電位によるＭＩＳ界面準位の測定法に関する研究

15-1. まえがき[113)-128)]

本章は，前章までとは独立に第13章の熱刺激測定法をＭＩＳ界面準位の測定に応用したものである。

金属－絶縁体－半導体（ＭＩＳ）構造における絶縁体－半導体界面の準位はＭＩＳ構造を持つ電子デバイスの特性に影響を与える。界面準位に捕えられた電荷は界面に電界を生じさせ，また準位への電荷の充放電やそれに伴なうキャリアの発生，再結合は素子の応答速度に関連する。近年，集積回路技術の進歩に伴ないその高密度化や高速化などが要求され，デバイスに対する仕様も一段ときびしくなっている。従って，デバイスを製作するためには，界面準位の密度，エネルギー，捕獲されたキャリアの寿命などを把握しておく必要がある。これらを測定する方法については，過去数十年にわたって極めて多くの研究が行なわれてきており，例えば現在実用素子として最も広く用いられているＳｉ－SiO_2界面についてはかなりの知見が得られている。そして，現在ではプロセス技術の向上から$10^{+11}\ eV^{-1}\ cm^{-2}$程度の界面準位密度に制御できるようになり，通常の集積回路では界面準位はそれほど問題とはならなくなってきた。しかし，一方ではＭＩＳ素子は種々の目的への応用が要求され，それぞれの目的に合う特性，材料を選ぶ必要が生じているため，相変わらずより詳細な界面特性の評価法が求められている。そして，界面電荷の量などを簡単に評価できる方法も必要である。

従来から行なわれてきたＭＩＳ界面準位の最も一般的な測定法は，交流インピーダンスの測定による容量－電圧法あるいはコンダクタンス法である。[113)-117)] また光を用いる方法など異なる原理によるものもあるが，これらの方法はいずれも定常状態下での測定を基礎としている。これに対して非定常状態，すなわち界面の状態が不平衡から平衡へ移行する過程をとらえる方法として熱刺激測定が考えられるが，最近，熱刺激電流（ＴＳＣ）[118)-124)]，熱刺激容量（ＴＳＣＡＰ）[125)]など

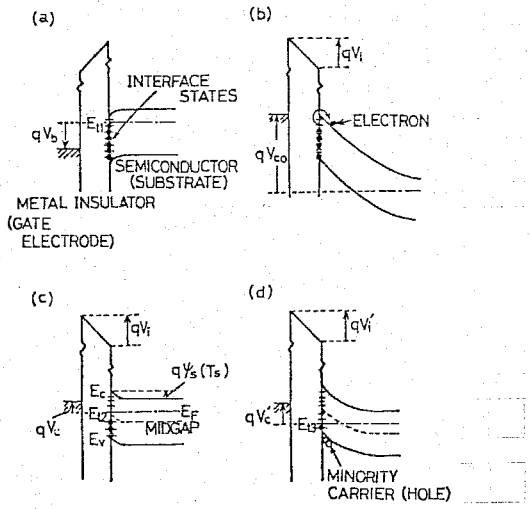
の方法がMIS界面準位の測定に応用され研究されている。しかしながら，上述による方法よりも開回路で測定される熱刺激表面電位（TSSP）の測定法がMIS界面準位の評価に，より有効であると考えられる。その理由は，測定が開回路で行なわれるために，TSCによる測定よりも電荷減衰の機構が単純であり，従って解析もかなり簡単化される利点を持っていること，さらに開回路での測定よりも安定であることである。本章ではTSSPと界面準位との関係を実験面と理論面から明らかにし，その結果をもとにして界面準位密度を求める手法を示し，$Si-SiO_2$界面に関する実験結果について述べる。

15-2. MIS界面準位のTSSPと理論[119)-(123)]

本節では，n型半導体を基板とするMIS構造試料（以下，n型試料と略称する）について述べるが，P型試料に対しても簡単に拡張することができる。

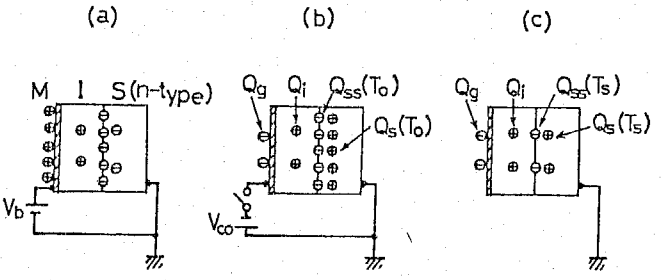
<15-2-1> TSSPの原理

界面準位に電子を捕えさせるために，まず室温でバイアスV_bを印加する。このときのエネルギー図を第15-1図（a）に示す。図示したようにE_{t_1}の深さまで電子が捕えられる。次に，V_bを印加したまま試料を液体窒素温度付近まで冷却する。この低温（液体窒素温度T_0）の状態でV_bを取り除き，新たにV_{c_0}を約1秒間印加後，切り離す。バイアスV_{c_0}はn型試料の場合，界面準位の電子を放出させ，半導体側へ移動させるために，$V_b - V_{c_0} > 0$となるように選ぶ。V_{c_0}印加直後には界面準位からの電子の放出はなく，系は（b）図で示される不平衡の状態となる。そ



第15-1図 TSSP測定におけるMISエネルギー図
（a）バイアスV_b印加時
（b）バイアスV_c印加直後
（c）平衡状態（空乏状態）
（d）平衡状態（反転状態）

の後試料を一定の割合β(k/s)で昇温させると，界面準位に捕獲されていた電子は次第に解放され，やがて系は(c)図のように平衡状態に達する。この昇温過程で，第15-2図のようにゲート電極を切り離し(半導体基板側を零電位とする)，その電位変化を測定するのがTSSpである。平衡状態は第15-1図(c)のように空乏状態か(d)図のように反転状態のいずれかとなる。どちらとなるかは，印加電圧V_{co}の大きさで定まり，負の大きな電圧を印加した場合には，トラップ電子の解放と少数キャリアの発生を伴なうため(d)図の反転状態となる。結局，上述の過程で第15-1図に示されるE_{t1}とE_{t2}又はE_{t3}の間にトラップされた電荷が昇温過程で解放され，それがゲート電極の電位の変化として現われる。以上述べた手順に従って測定されるTSSpの理論について次に述べる。



第15-2図　TSSp測定におけるMIS試料中の電荷分布
(a)バイアスV_b印加時
(b)バイアスV_{co}印加直後
(c)平衡状態

<15-2-2>　TSSpの理論

本章で展開されるTSSpの理論では次の条件を仮定している。

(i)ゲート電極上の電荷Q_gは昇温中変化せず一定である。すなわち，絶縁膜を通して電荷はリークしない。

(ii)絶縁膜中の電荷Q_i(イオンなど)は低温であるために移動しない。

(iii)半導体中での不純物濃度は一定とし，ドナー準位はイオン化されているものとする。

(iv)界面準位における周波数因子νはエネルギー及び温度に依存しない。

(v)エネルギーバンド幅や誘電率の温度依存性は無視できるものとする。

まず，第15-2図に示すように試料内の電荷の中性が保たれなければなら

ないから,

$$Q_g + Q_i + Q_{ss}(T) + Q_s(T) = 0 \cdots (15-1)$$

ここで, Q_g はゲート電極上の電荷, Q_i は絶縁膜中の電荷(イオンなどの空間電荷), Q_{ss} は界面準位の電荷, Q_s は半導体中の空間電荷であり, いずれも単位面積あたりの量とする。(15-1)式を(i), (ii)の条件のもとで温度Tについて微分すれば,

$$\frac{dQ_{ss}}{dT} = -\frac{dQ_s}{dT} \quad \cdots\cdots (15-2)$$

が成立する。すなわち, Q_{ss} と Q_s の変化は同じであることがわかる。また, Q_g, Q_i は昇温中一定であるから, 絶縁膜に加わる電圧 V_i も変化しない。従って, 観測されるゲート電位 $V_g(T)$ は次式で示される。

$$V_g(T) - V_i + \psi_s(T) \cdots (15-3)$$

ここで, $\psi_s(T)$ は半導体表面電位を表わしている。そして, 上式より V_g の温度変化は ψ_s の温度変化だけによっていることがわかる。また V_i は, 絶縁膜の単位面積あたりの容量 C_i に蓄わえられる電荷より初期条件で定まる。(15-2), (15-3)式はTSSPに特有な関係式で解析の簡単化に役立つ。以下では非定常状態と定常状態におけるTSSPの理論を分けて述べる。

(a) 非定常状態の理論解析

まず, V_i は次のようにして決定される。初期の低温(温度 T_0)の状態で, ゲート電極に V_{c_0} なる電圧を印加した直後は, 第15-1(b)図の非定常状態(deep-depletion)となり, その場合以下の関係式が成立する。

$$V_{c_0} = V_g(T_0) = V_i + \psi_s(T_0) \quad \cdots\cdots (15-3)'$$

$$\psi_s(T_0) = -\frac{\{Q_s(T_0)\}^2}{2q\varepsilon_s N_D} \quad \cdots\cdots (15-4)$$

$$V_i = -\frac{Q_s(T_0) + Q_{ss}(T_0) + Q_i'}{C_i} + \phi_{MS} \quad \cdots (15-5)$$

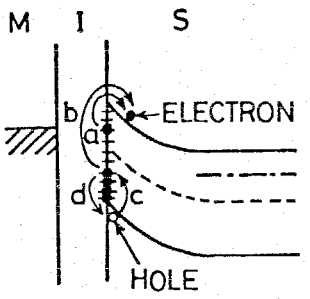
ただし，qは電子電荷，ε_sは半導体の誘電率，N_Dは不純物濃度，C_iは絶縁膜の容量，ϕ_{MS}はゲート電極の金属と半導体の仕事関数差でQ_i'はQ_iにより半導体に誘起された電荷である。(15-3′)は(15-3)式の温度T_0における関係式で，(15-4)，(15-5)式はMIS構造素子についてよく知られた式である。(15-3′)～(15-5)式より$Q_s(T_0)$，$\psi_s(T_0)$を消去すれば，V_iは次式で示される。

$$V_i = \left\{ q\varepsilon_s N_D C_i^{-1} + Q_{ss}(T_0) + Q_i' - C_i\phi_{MS} + \left[q\varepsilon_s N_D C_i^{-1}(q\varepsilon_s N_D C_i^{-1} - 2Q_{ss}(T_0) - 2Q_i' + 2C_i\phi_{MS} - 2C_iV_{c0})^{\frac{1}{2}} \right\} \right/ C_i$$

$\cdots\cdots (15-6)$

TSSP測定から実験的に求められる$Q_{ss}(T_0)$とV_{c0}が与えられると，(15-6)式よりV_iが計算される。そして，$\psi_s(T_0)$と$Q_s(T_0)$は(15-3′)と(15-4)式より，また$Q_g + Q_i$は$Q_{ss}(T_0)$と$Q_s(T_0)$を用いて(15-1)式より求められる。

表面電位$\psi_s(T)$を計算するためには，電荷の減衰する機構を考えなければならない。今，第15-3図中aで示すように，Q_{ss}の減衰が浅い界面準位からの熱励起によるとすれば，$Q_{ss}(T)$は次式で表わされる。



第15-3図　MIS界面におけるキャリアの挙動

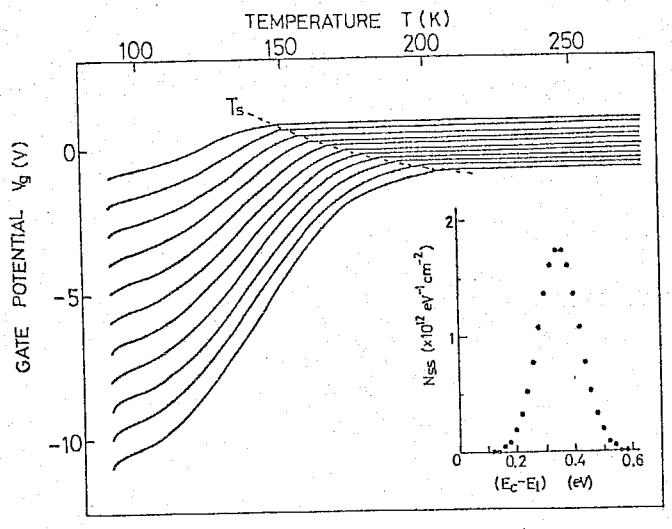
$$Q_{ss}(T) = \int_{E_v}^{E_c} q N_{ss}(E_t) \times \exp\left[-\frac{\nu}{\beta}\int_{T_0}^{T} \exp\left(\frac{E_t - E_c}{kT'}\right) dT'\right] dE_t \quad \cdots\cdots (15-7)$$

ただし，E_c と E_v はそれぞれ半導体のバンド端のエネルギー，N_{ss} は界面準位のエネルギー分布，E_t は界面準位のエネルギー，ν は界面準位の離脱周波数である。今，$\psi_s(T)$ に対して（15－4）式と同様に空乏層近似が成立つものとすれば，次式が得られる。

$$\psi_s(T) = \{Q_s(T)\}^2 / 2q\varepsilon_s N_D$$
$$= \{Q_{ss}(T) + Q_g + Q_i\}^2 / 2q\varepsilon_s N_D \quad \cdots\cdots (15-8)$$

ただし，（15－8）式では（15－1）式の電荷中性の条件を用いた。（15－7）式を（15－8）式に代入すれば，ψ_s の温度変化が求められ，さらに（15－3）式を用いればTSSPの理論曲線 $V_g(T)$ が計算される。

第15－4図は，同図に挿入図で示すように $N_{ss}(E_t)$ としては平均値0.35eV，標準偏差0.07eVのガウス分布を仮定して，V_{G_0} を変えて数値計算を行なった例である。ただし，初期では界面準位は電荷で満たされているとした。そして，簡単のため Q_i と ϕ_{MS} は零であるとした。図からわかるようにTSSPは，初期には単調に減衰し，その後一定の電位となる曲線である。一定の電位となる温度範囲は平衡状態と考えられ，（b）項で詳しく述べる。



（挿入図は仮定したエネルギー分布を示す）

第15－4図　n型試料のMIS構造 Si－SiO₂ 界面準位によるTSSP理論曲線

計算条件

$N_D = 10^{15}\ cm^{-3}$

$C_i = 2.3 \times 10^{-8}\ F/cm^2$

$Q_{ss}(T_0) = 5.0 \times 10^{-8}\ C/cm^2$

$\nu = 10^{10}\ sec^{-1}$

$\beta = 0.3\ k/sec$

$Q_i = 0,\ \phi_{MS} = 0$

負の大きなV_{CO}を印加した場合には，前述の熱励起の場合と異なり反転層内での少数キャリアの発生機構を考えなければならず，界面における電荷の挙動は複雑である。ここでは，surface generationと呼ばれる界面準位を通して起こる現象を考えるが，以下に述べる過程によって起こる機構である。まず，温度上昇に伴ない浅い準位にトラップされた電子が熱励起により解放される（第15-3図 a）。その後，価電子帯から電子が空の界面準位を介して伝導帯に励起される。励起された電子は電界により半導体バルクの方向に引き出されるが，正孔はそのまま界面にとどまる（第15-3図 b，c）。しかし，深い準位にある電子は励起されるよりも反転層内に発生した正孔と再結合する確率の方が高く，これにより界面準位の電子と反転層内の正孔が消滅する（第15-3図 d）。このような過程がくり返され，やがて界面準位にある電子が反転層内の正孔と再結合する確率と価電子帯から電子が界面準位へ励起される確率が等しくなって平衡状態となる（第15-1図 d）。従って，このような機構では，界面にトラップされている電荷の変化は次のように書ける。

$$\frac{dQ_{ss}}{dT} = q\left(\frac{dP}{dT} - \frac{dn}{dT}\right) \quad \cdots\cdots (15-9)$$

ここで，Pは反転層内の発生した正孔密度，nは伝導帯に励起された電子密度である。（15-9）式は界面準位のエネルギーE_{tp}を用いれば次のように書き直すことができる。

$$\frac{dQ_{ss}}{dT} = -q N_{ss}(E_{tp}) \frac{dE_{tp}}{dT} \quad \cdots\cdots (15-10)$$

ここで，E_{tp}は正孔が励起される確率と捕獲される確率とが等しくなる界面準位のエネルギーを表わし，非定常状態におけるホールのフェルミ準位を示している。従って，（15-10）式を積分すれば$Q_{ss}(T)$が得られ，

$$Q_{ss}(T) = -\int_{E_{tp}(T_0')}^{E_{tp}(T)} q N_{ss}(E_{tp})\, dE_{tp} + Q_{ss}(T_0')$$

・・・・・（15－11）

ただし，T_0'はgenerationの開始する温度である。（15－11）式を（15－7）式の代わりに用いれば，このような機構が起こる場合のTSSP曲線を求めることができる。

（b） 定常状態の理論解析

第15－1図（c）に示されるように定常状態では，フェルミ準位より浅い界面準位にトラップされる電子はなく，同準位より深い界面準位ではトラップ電子で充満される。この状態でさらに試料の温度を上昇させれば，フェルミ準位が変化するので$Q_{ss}(T)$もそれに従って次式のように変わる。

$$Q_{ss}(T)=\int_{E_v}^{E_c} q N_{ss}(E_t) F(E_t)\, dE_t \quad \cdots (15-12)$$

ここで，$F(E)$はフェルミ分布関数で

$$F(E)=\left[1+\exp\left\{E-E_F(T)\right\}\right]^{-1} \cdots (15-13)$$

界面におけるフェルミ準位はψ_sに依存する。すなわち，

$$E_F(T)=E_c+q\psi_s(T)=kT\ln(N_c/N_D)$$

・・・・・（15－14）

ここで，N_cは半導体の伝導帯の有効状態密度である。V_i，Q_gは平衡状態となっても保存されるから，平衡状態下での$V_g(T)$も計算できる。そのためには，（15－12）式を（15－7）式の代わりに用いればよいが，（15－13），（15－14）式からわかるように$\psi_s(T)$依存するため，$V_g(T)$は単純に求められず数値計算しなければならない。その場合，ψ_sとQ_sの関係は空乏層状態ではないので（15－8）式では示されず，後述する（15－22）式によらなければならない。第15－4図のフラットな部分がその計算結果であるが，$V_g(T)$の変化はほとんどないとみられる。それは，この領域でのフェルミ準位の移動がkTの数倍程度であるためである。従って，

不平衡から平衡状態へ移行する温度はかなり明確に決定できる。第15－4図中にこの温度をT_sとして示したが，破線で示したT_sの特性が以後の解析の基礎となる。この温度T_sは（15－7）式より次の関係式を満足するものであるとして決定できる。

$$\exp\left\{-\frac{\nu}{\beta}\int_{T_0}^{T_s}\exp\left(\frac{E_F(T_s)-E_c}{kT'}\right)dT'\right\}=\frac{1}{2} \quad \cdots\cdots(15-15)$$

ここで，E_tは$E_F(T_s)$で置き換えられている。すなわち，$E_t=E_F(T_s)$の界面準位の電荷の占有確率が1／2になるという意味である。

以上のTSSP理論曲線の解析から，以下の結論が得られる。界面準位より熱励起によって電子が解放される場合のTSSPは単調に減衰するものである。しかし，減衰の仕方は非定常状態と定常状態では非常に異なっている。すなわち，非定常状態では減衰は激しいが定常状態では非常に小さい。その結果，非定常状態から定常状態に移行する温度T_sがかなり明確に求められる。そして，このT_sは界面準位エネルギー分布を求めるための重要な特性となりうる。

15－3 実験

＜15－3－1＞ 試料

実験に用いた試料はシリコンを1,000°C前後の高温で酸化してSi－SiO_2構造としたものである。シリコン基板としては第15－1表に示すような種類の結晶面方位を持つものをP，n両型，計6種類用いた。このシリコン表面を鏡面研摩，化学エッチしたのち，水蒸気を含む酸素中で熱酸化し，1,000～1,500Åの厚さ

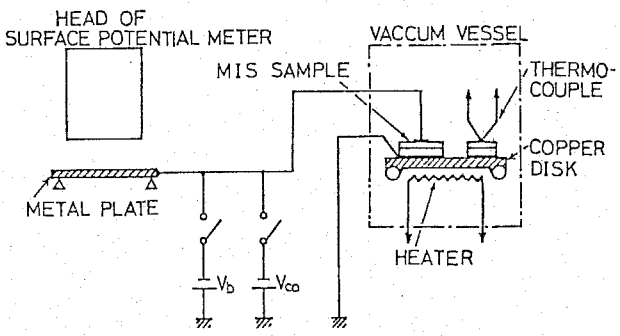
Sample No.	Substrate (Si) Type	Orientation	Doping density (cm^{-3})	Insulating film (SiO_2) Oxidation temperature (°C)	Film thickness (Å)
N-1	*n*	(111)	1.5×10^{15}	1050	1500
N-2	*n*	(110)	1.4×10^{14}	950	1000
N-3	*n*	(100)	6.6×10^{14}	950	1000
P-1	*p*	(111)	4.1×10^{15}	1050	1500
P-2	*p*	(110)	5.4×10^{15}	950	1000
P-3	*p*	(100)	2.5×10^{15}	950	1000

第15－1表 試料の作製条件

のSiO_2膜を形成した。ゲート電極としてはAlを直径約1．4mmの円形に蒸着して用い，また基板裏面のオーミック電極としてもAlを用いた。

〈15－3－2〉 測り定方法

測定に用いる回路を第15－5図に示す。試料は10^{-5}Torr程度の真空中に置かれ，ヒータによる加熱と液体窒素による冷却とが行なえるようになっている。試料の温度は被測定試料に近接して置かれた同様の基板上に熱電対を固定して測定される。ゲート電位の測定は，真空系の外に置かれた金属板とゲート電極を接続し，その金属板の電位を表面電位計*により測定するという方法が用いられた。この電位と温度の関係はX－Y記録計により記録された。電位測定の誤差を少なくするためには，試料の容量に比して金属板の対地容量を十分小さくする必要がある。本実験では金属板の対地容量は約5pF，一方試料の容量は100pF以上であるため誤差は小さいと思われる。また，ゲート電極電荷の漏れはSiO_2膜の抵抗が室温以下では極めて大きいため，ほとんど認められなかった。外部回路における漏れを防ぐために金属板などの支持にはテフロンが用いられた。



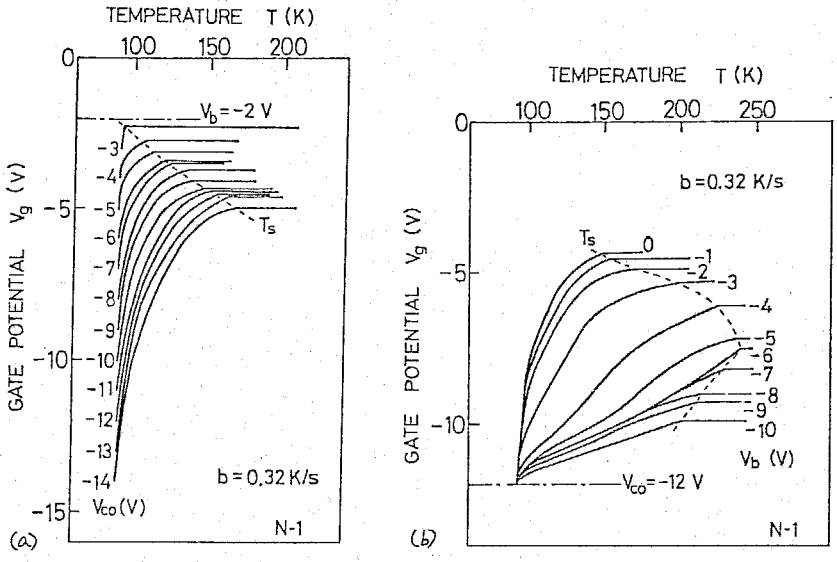
第15－5図 TSSPの測定回路

15－4 TSSPおよびV_c～T_s特性

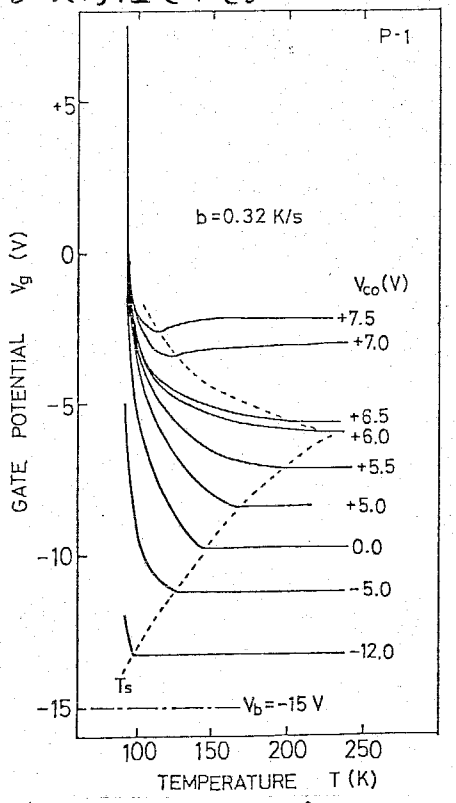
Al－SiO_2－Si，MIS試料におけるTSSPの測定例を第15－6，7図に示す。第15－6図はn型試料の場合で，第15－7図はp型試料の場合である。両者の電位の減衰の方向は互に逆になる。電位は低温で大きく変化するが，温度が上昇するとやがてほぼ一定値に落ち着く第15－4図の理論曲線とよく似た特徴をもっている。そして，第15－6，7図とも点線で示すように特性温度T_sが求められる。電位はP，n型を問わずいつも負の値である

* 川口電機 SSV II-40形

が，SiO_2膜中に正のイオン（$Q_i > 0$）が存在するためと考えられる。第15-6図(a)，7図はV_bにより蓄積層を形成し，この電圧を一定としてV_{co}を種々変えることで得られたものである。第15-6図(b)は界面準位の一部を空にするためにV_bを種々変えてV_{co}を一定としたときに得られたものである。界面が平衡に達する温度T_sとそのときのゲート電位V_c（$= V_g(T_s)$）の関係は（図中の点線），試料によって定まる不変の曲線になることがわかる。定常状態のn型試料では，V_cが負の側に大きくなるに従い深い界面準位の電荷が解放される。この関係はp型試料では逆である。一方，一般にT_sは深いエネルギー準位に対応するものほど高温になると考えられる。第15-6図(a)の結果はそのようになっている。しかし(b)図の結果は，$V_b < -6$Vに対してはT_sは高温に伸びずに逆に低温側に移行している。



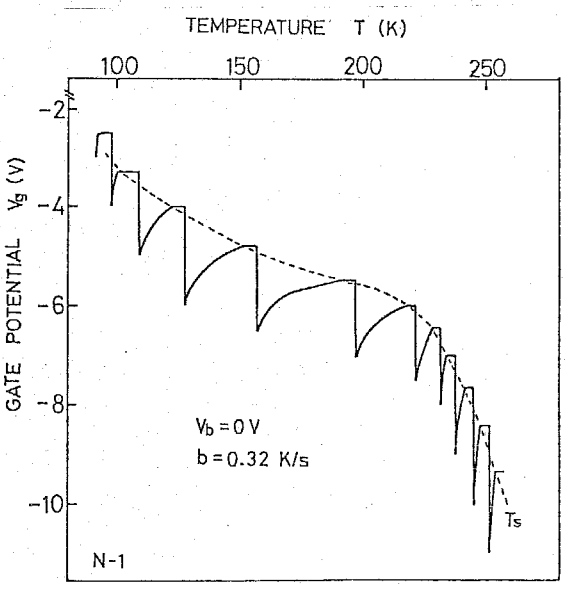
第15-6図 Al-SiO_2-Si（n型）MIS試料のTSSp (a) V_{co}依存性（$V_b = -2$ V），(b) V_b依存性（$V_{co} = -12$ V）



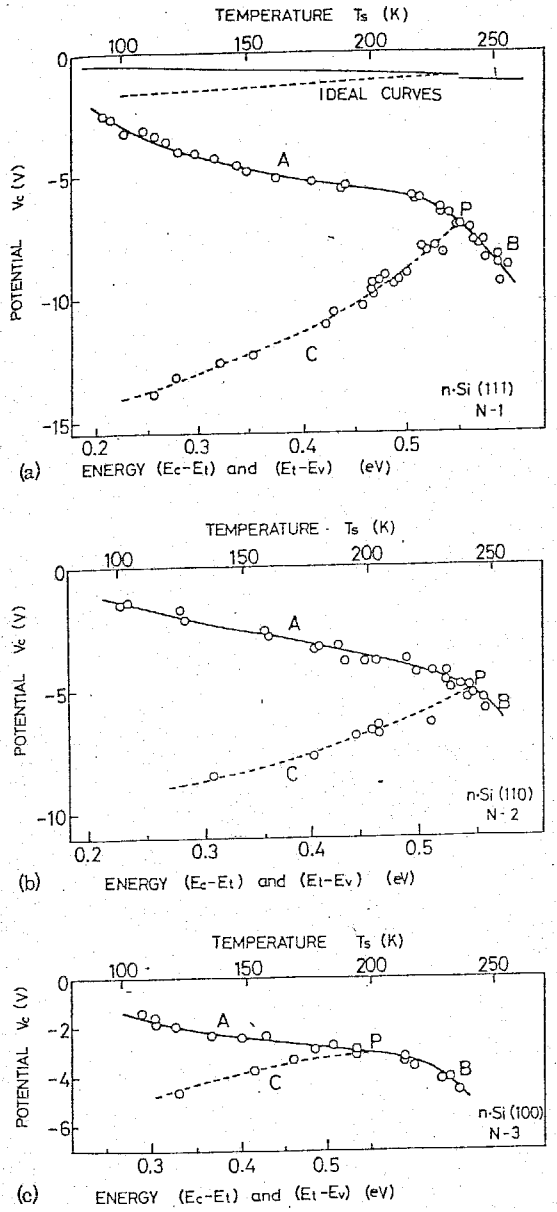
第15-7図 Al-Si_3O_2-Si（p型）MIS試料TSSp（$V_b = -15$ V一定，V_{co}変化）

同様の結果は，第15－7図のp型試料の$V_{c_0} \geq 6$Vの範囲でみられている。その上P型試料では，この範囲でTSSp曲線が最小値をとる異常な曲線となっている。これらの現象については後に述べる。TSSpの曲線は第15－6図(b)ではV_bを変えることにより大きく変化するが，同図(a)でV_{c_0}を変えた場合にはそれほど変化しない。このことは，TSSpの曲線は初期バイアス条件で定まる$Q_{ss}(T_0)$に強く依存していることを示している。しかしながら，$V_c - T_s$特性曲線はこれらの条件によらずに試料によって定まる。したがって，任意のV_bとV_{c_0}の組み合わせによって$V_c - T_s$特性を求められることになる。

く15－2 7節で，$V_c - T_s$特性が界面準位を評価する上で重要な手掛りとなり得ることを述べた。この$V_c - T_s$特性を求めるには上述したように，任意のV_bとV_{c_0}の組み合わせで実験を多数回行なえばよいわけであるが，熱刺激測定では一回の測定時間が長くかかるために厄介である。そこで，この特性をより短時間に簡単に得る方法を考案した。この方法による測定例を第15－8図に示す。まず，これまでに述べた通常の方法で一つのT_sを得る。その後，昇温を続けながらバイアスV_{c_1}を再度，瞬時印加し，このV_{c_1}による新たなT_sとV_cを得る。このようにして次々にV_{c_2}, V_{c_3}・・・とバイアスを印加して，一度の昇温で(T_s, V_c)の組を多く得ることができる。第15－8図の例では一回の昇温で10組程度の(T_s, V_c)が得られ，破線で示すような$V_c \sim T_s$曲線の測定時間が大幅に短縮される。しかし，このような簡便法を用いても，昇降温を多数回繰返し



第15－8図　簡便法により測定されたTSSpの例

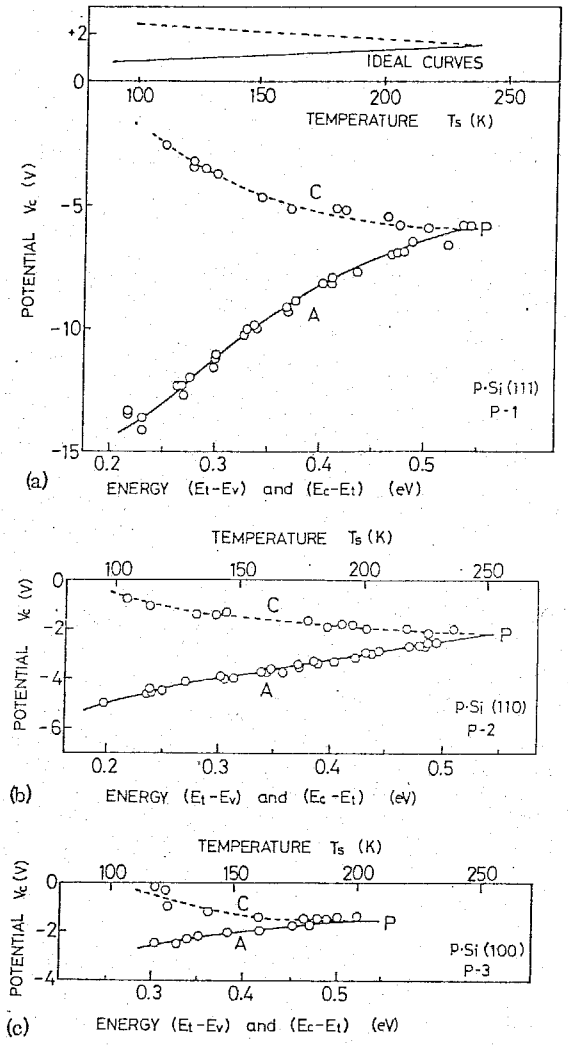


第15-9図　n型試料の V_c ~ T_s 特性および T_s と $(E_c - E_t)$ あるいは $(E_t - E_v)$ との関係

(a)　N-1試料

(b)　N-2試料

(c)　N-3試料



第15-10図　P型試料の V_c ~ T_s 特性および T_s と $(E_t - E_v)$ あるいは $(E_c - E_t)$ との関係

(a)　P-1試料

(b)　P-2試料

(c)　P-3試料

て得られたV_c ～T_s特性は全く同一であった。第15－9，10図はn，P型試料におけるV_c ～T_s特性である。各曲線のうちAおよびBの実線で示した部分は正常な特性で，上記の簡便法を2～3回繰返して求めたものである。破線で示したCの部分は異常な特性であり，この部分には簡便法を用いることができない。n型試料とP型試料における大きな違いは，P型試料にはBの部分の特性が現われない点である。このV_c ～T_s特性を用いて界面準位の分布などを求める方法について次節で述べる。

15－5　TSSPによる界面準位の評価

<15－5－1>　界面準位のエネルギーと温度の関係

V_c ～T_s特性から界面準位のエネルギー分布を求めるために，まず界面準位のエネルギーE_tと温度T_sの関係について考える。

（15－7）式で単一エネルギーE_tの電子トラップからのキャリアの解放の場合を考えると次式が得られる。

$$Q_{ss}(T) = q N_{ss} \exp\left\{ -\frac{\nu}{\beta} \int_{T_0}^{T} \exp\left(-\frac{E_c - E_t}{kT'} \right) dT' \right\} \quad \cdots\cdots (15-16)$$

上式で，$d^2 Q_{ss} / dT^2 = 0$となる温度を$T = T_m$とすれば，次の関係式が成立つことが容易にわかる。

$$\beta (E_c - E_t) / kT_m^2 = \nu \exp\left[-(E_c - E_t)/kT_m \right] \quad \cdots\cdots (15-17)$$

（15－17）式は単一トラップからキャリアが解放されるときに，TSCピーク温度T_mで成立するものであることがよく知られている。今，（15－16）式中の積分項を次の様に書き直してみる。

$$\frac{\nu}{\beta} \int_{T_0}^{T} \exp\left(-\frac{E_c - E_t}{kT'} \right) dT' = \frac{\nu}{\beta} \frac{kT^2}{(E_c - E_t) + kT} \exp\left(-\frac{E_c - E_t}{kT} \right)$$

・・・・・（15－18）

そして，温度T＝T_mで（15－17）式を（15－18）式に代入すれば，kT_mが（$E_c - E_t$）より十分小さいという近似のもとで（15－18）式は1に等しいことがわかる。従って，（15－16）式より，

$$Q_{ss}(T_m) \simeq \beta N_{ss}/e = Q_{ss}(T_0)/e \quad \cdots (15-19)$$

なる関係が得られる。この式は，（15－15）式の右辺の$\frac{1}{2}$を$\frac{1}{e}$に置き換えただけで，ほとんど（15－15）式と等しい。このことは，温度T_mで準位に捕えられていた電荷量が初期の約1/eに減衰することを意味している。そして，単一トラップ準位からの電荷の放出は狭い温度範囲で起るので，T_mとT_sはほぼ等しいとみられる。ただし，界面準位は一般にエネルギーが分布していると考えられるから，T_sはV_bとV_{co}によって定まるキャリアの解放される準位で空になった最も深いものに対応していると考えられる。すなわち，E_tとT_sの関係は（15－17）式のT_mをT_sで置き換えて与えられることになる。

$$\beta(E_c - E_t')/kT_s^2 = \nu \exp\left[-(E_c - E_t')/kT_s\right]$$

・・・・・（15－17′）

（15－17）式でT_mと（$E_c - E_t$）の関係を陽に求めることは難かしいが，Simmons氏らは本実験で用いるような温度範囲ではT_mと（$E_c - E_t$）はほとんど直線関係とみなせることを示している。従って，（15－17′）式でのT_sと（$E_c - E_t'$）の関係も直線とみなせる。ところで（15－17），（15－17′）式の関係は浅い準位にだけ適用されるもので，少数キャリアの発生を伴なうような深い準位に対しては別の取扱いが必要である。最初に$V_c - T_s$特性のうち浅い準位に対応すると思われるAの部分（第15－9，10図参照）におけるE_tとT_sの関係を求める。まず（15－17′）式において未知な量，離脱周波数νを求めなければならないが，通常TSCで用

いられる方法は昇温速度βを変えて測定したT_mのずれから（15－17）式を使ってνを求めるものである。（15－17′）式においてこの方法を利用するとP点（A，BおよびCの部分の交差する点）が大体バンド中央のエネルギーに相当することが実験的に確かめられた。また，後に示す実験結果の検討からも，P点はバンド中央に対応すると考えられる。しかし昇温速度の変化によるT_sのずれは小さく，求められるνの値には誤差が含まれやすい。そこで，ここではP点をバンド中央，すなわち$(E_c - E_t) = 0.55$eVに対応する点とし，P点の温度を（5－17′）式に代入してνを求めた。各試料のνの値を第15－2表に示す。これらのνの値を（15－17′）式に用いて$(E_c - E_t)$とT_sの関係を求めることができる。一方，Cの部分における$(E_v - E_t)$とT_sの関係は次のように考えることができる。この部分では深い準位に対応するT_sが低下しており，このことは測定されているエネルギーがn型の場合$(E_c - E_t)$ではなく$(E_t - E_v)$に相当していると考えることができる。測定結果として$(E_t - E_v)$が観測されるためには，少数キャリアの発生がV_{co}印加後すみやかに起こり，この正孔と準位にある電子と再結合を起こす過程を考える必要がある。このような機構については後に検討するが，この考えを採用すれば上述の浅い準位に対する取扱いを深い準位についても適用できる。すなわち，（15－17′）式において$(E_c - E_t)$を$(E_t - E_v)$に置き換えてT_sと$(E_t - E_v)$の関係を求めておき，準位の深さを必要とする場合には半導体の禁制帯幅を用いて$(E_c - E_t)$に換算すればよい。

Sample No.	Orientation	ν (sec^{-1})	Q_{ss}/q (cm^{-2})	$E_{t1} \sim E_{t2}$ (eV)
N-1	(111)	2.2×10^{10}	-1.50×10^{12}	0.20～0.85
N-2	(110)	1.1×10^{10}	-1.43×10^{12}	0.21～0.81
N-3	(100)	3.7×10^{12}	-5.2×10^{11}	0.27～0.78
P-1	(111)	1.6×10^{10}	1.50×10^{12}	0.21～0.85
P-2	(110)	2.6×10^{9}	6.9×10^{11}	0.18～0.89
P-3	(100)	7.3×10^{11}	3.4×10^{11}	0.28～0.82

第15－2表　TSSpから得られた離脱周波数νと界面準位密度Q_{ss}/q

以上，述べた中で離脱周波数νはエネルギー，温度に無関係な定数と仮定し

ている。（15－17′）式を用いて各試料について（$E_c - E_t$）および（$E_t - E_v$）とT_sの関係を求めたが，この関係は第15－9，10図の横軸に示されている。

〈15－5－2〉 界面準位密度とエネルギー分布

界面が平衡に達したときの電位V_cと界面準位密度について考える。V_cは温度T_sにおけるゲート電位であるから，（15－3），（15－5）式で$T = T_s$として，$V_c = V_g(T_s)$は次のように書ける。

$$V_c = -\left\{ Q_{ss}[\psi_s(T_s)] + Q_s[\psi_s(T_s)] + Q_i' \right\} / C_i + \phi_{MS} + \psi_s(T_s) \quad \cdots\cdots (15-20)$$

いま界面準位密度を求めるために，理想的な状態におけるV_c，すなわちQ_{ss}，Q_i，ϕ_{MS}がすべて零であると想定したときのV_cを$V_{c,ideal}$とする。すなわち，

$$V_{c,ideal} = -Q_s[\psi_s(T_s)] / C_i + \psi_s(T_s) \quad \cdots\cdots (15-21)$$

この$V_{c,ideal}$は次の様にして計算することができる。まず$\psi_s(T_s)$は（15－14）式において$E_F(T_s)$と$E_t(T_s)$が一致していることを考慮して，さきに求めた$(E_c - E_t)$の値を用いて求められる。$\psi_s(T_s)$が定まると$Q_s[\psi_s(T_s)]$は次式を用いて求めることができる。

$$Q_s = \left[2\varepsilon_s kT n_i \left\{ e^{\beta\psi_b}(e^{-\beta\psi_s} + \beta\psi_s - 1) + e^{-\beta\psi_b}(e^{\beta\psi_s} - \beta\psi_s - 1) \right\} \right]^{\frac{1}{2}}, \quad T = T_s \quad \cdots\cdots (15-22)$$

ここでψ_bは$\exp(\beta\psi_b) = n_i / N_D$で定義される。ただし，$n_i$は半導体の真性キャリア濃度，$\beta$は$q/kT$を示している。ところで（15－22）

式の導出では次のような仮定がなされていることに注意しておこう。

(i) 半導体中のドナーあるいはアクセプタはすべて完全にイオン化している。

(ii) ドナーあるいはアクセプタ濃度はバルク中より界面まで一定である。

(iii) 半導体には縮退がなく，ボルツマン分布が適用できる。

TSSpの実験は100°K以上の温度範囲で行なわれており，(i)の仮定は成立していると考えられる。また，測定されるエネルギー準位(界面準位)の深さは3kTsより十分大きいので(iii)の仮定も成立しているとみられる。従って，(ii)の仮定だけが実質上問題となるが，一般の濃度分布について(15-22)式の関係を求めることは困難である(第14章参照)ので本解析においてはこれを正しいものとした。上記の条件のもとで(15-22)式を用いて(15-21)式から $T_s \sim V_{c,ideal}$ 特性を算出することができる。第15-9，10図中に「ideal curve」として示した曲線はこの計算例である。実線が部分Aに対応し，破線は部分Cに対応している。図からわかるように $T_s \sim V_{c,ideal}$ の関係はほぼ直線になる。

エネルギー E_t と $E_t + dE_t$ の間にある界面準位の電荷 dQ_{ss} が，$C_i \times d(\Delta V_c)$ で示されることは(15-20)，(15-21)式より明らかである。ただし，$\Delta V_c = V_{c,ideal} - V_c$ とする。従って，任意のエネルギー E_{t1} (T_{s1}) と E_{t1} (T_{s2}) の間にある界面電荷 Q_{ss} は，

$$Q_{ss}(E_{t1} \sim E_{t2}) = C_i \{ \Delta V_c(T_{s1}) - \Delta V_c(T_{s2}) \} \quad \cdots\cdots (15-23)$$

で与えられる。以上のように $V_c - T_s$ 特性を用いれば容易に観測される界面電荷の総量を求められる。(15-23)式の関係は部分A，B，Cを問わず成立するものである。そして，大雑把に言えば，界面電荷の総量は部分AとCの電位差に相当するものである。第15-2表には第15-9，10から計算した総量を示した。電荷量はよく知られているように結晶面方位が(111)，(110)，(100)の順になっており，周知の結果と一致している。

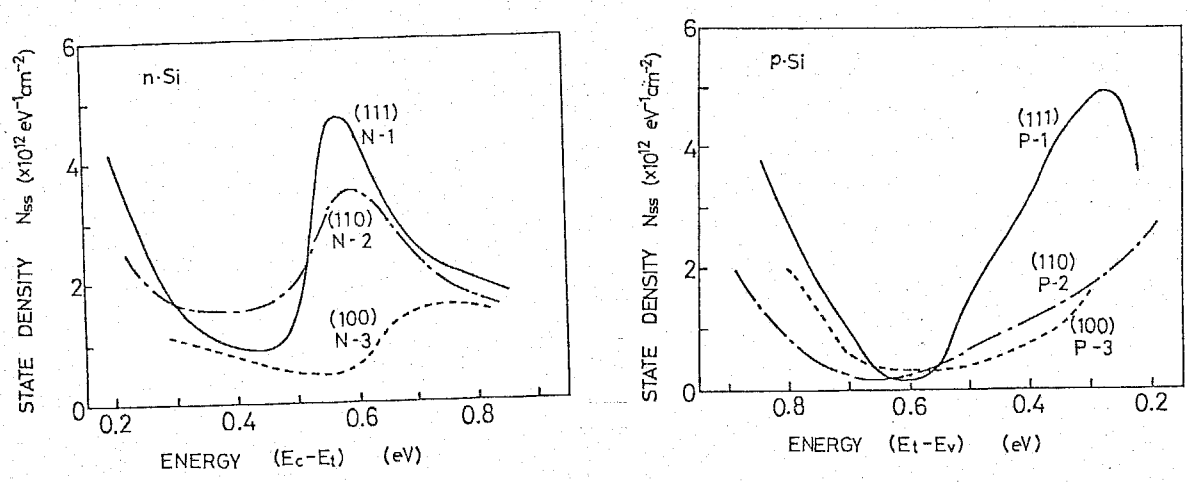
（15－23）式を用いれば，エネルギー分布 $N_{ss}(E_t)$ は Q_{ss} を E_t で微分して，

$$N_{ss}(E_t) = \frac{1}{q}\left|\frac{dQ_{ss}}{dE_t}\right|$$

$$= \left(\frac{C_i}{q}\right)\left|\frac{d(\Delta V_c)}{dT_s}\left(\frac{dE_t}{dT_s}\right)^{-1}\right| \quad \cdots (15-24)$$

より求めることができる。ここで dE_t/dT_s はさきに述べたように一定の定数とみなすことができる。

以上述べた方法により，$Si-SiO_2$ 界面の準位について，A，Cの部分に適用してエネルギー分布を求めた。この結果を第15－11図に示す。なお，（15－24）式における $d(\Delta V_c)/dT_s$ は計算機による数値計算で求められた。これらの結果をみると，界面準位の密度は Si 基板の結晶面方位が（111），（110），（100）の順に小さくなっており，従来，知られている結果と一致している。



（a） n型試料　　（b） P型試料

第15－11図 TSSPによって得られた界面準位のエネルギー分布

<15－5－3> 界面準位の寿命

以上の結果をもとにして界面準位の時定数τを評価することができる。τは

界面にトラップされているキャリアが熱励起により解放される場合の時定数で,

$$\tau = \nu^{-1} \exp[(E_c - E_t)/kT] \cdots (15-25)$$

で与えられる。(15-25)式から任意の温度に対して,第15-2表のνの値を用いてτが計算される。Cの部分に対しては,上式の($E_c - E_t$)を($E_t - E_v$)と変えれば適用できる。その結果,最大のτは禁制帯の丁度半分の深さ(midgap)のとき得られ,最小のτは伝導帯および価電子帯の下端および上端から最も近い準位のとき求められる。例えば,N-1試料では最大のτはおよそ0.08 sec,最小のτは伝導帯からの深さが0.2eVであるとして約5×10^{-10} secとなる。ただし,T=300 Kとした。

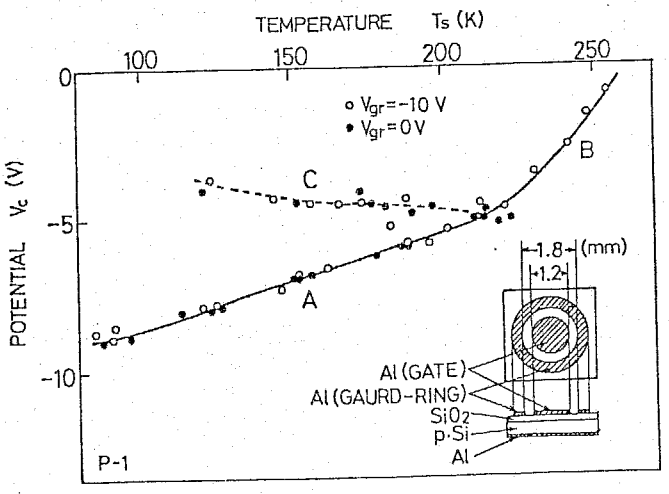
15-6 検討[126]-[128]

<15-6-1> $V_c \sim T_s$ 特性の各部分における機構

この節では$V_c \sim T_s$特性の各部分の機構について検討する。Aの部分は浅い界面準位からトラップ電荷が熱励起によって放出される過程である(第15-3図 a)。Bの部分はgenerationの過程に相当する。generationの機構としては,界面準位を介して起こる場合と半導体空乏層内の深いトラップ準位を介して起こる場合の二通りが考えられる。Bの部分は次の理由により前者であると考えることができる。バイアス条件によってT_sは連続的に変化するのであるから準位は分布していると思われるが,単結晶の半導体ではバルク内でトラップが分布しているとは考えにくい。さらに,Bの部分に相当するバイアス条件で観測されるTSCピークの形は,Uranwala氏らがsurface generationの機構によるとして報告している結果と非常によく似ている。以上のようにBの部分に対してはSurface generationの機構を考えることが妥当であると思われる。一般にSiでは,バルク内の深いトラップの準位密度は小さいと考えられ,この効果は界面の効果によって覆い隠されているものとみられよう。

Cの部分は§15-5-17項で述べたように，少数キャリアがV_{co}印加直後にほとんど温度によらず界面に供給され，これと準位に捕えられたキャリアが再結合するとすれば説明できる。第15-3図のCとdの過程だけで系が平衡に達することができれば，観測されるエネルギーは励起過程Cで決まり，準位が深くなると観測されるエネルギーは小さくなる。そこで，この過程の基礎となる少数キャリアの界面への供給機構について考える。

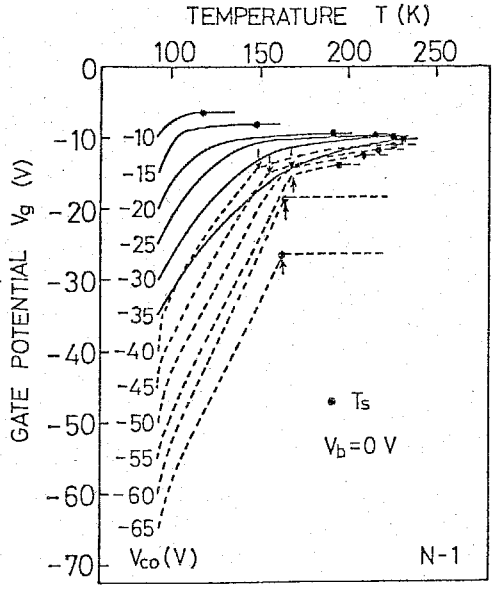
P型試料の場合では，SiO_2膜中に通常正イオンが存在するため，バイアスを印加しない状態でもSi表面に電子が引き寄せられて反転層が形成される。従って，低温でも深い空乏状態を形成するようにV_{co}を印加すると，ゲート電極周囲の反転層内の電子がゲート電極下へ流入する。この流入に要する時間は界面準位を介した少数キャリアの発生に要する時間に比べて十分短いと考えられる。このような現象が起こっていることは，ゲート電極周囲にガード電極を設けた試料を用いて実験により確かめることができる。第15-12図中の挿入図に示されるような試料を用意し，$V_c - T_s$特性の測定を行なって同図にみられる結果を得た。すなわち，ガード電極の電圧を$V_{gr} = -10$Vと負にバイアスをした場合には，$V_c \sim T_s$特性はn型試料でみられるものと同じに，Bの部分が明確に現われる。これは，ガード電極を負電位にバイアスしたことにより，ゲート電極の周りからは十分な電子が流入しないためと考えられる。そして，このような場合には第15-7図にみられたTSSP曲線が最小値を持つような現象もみられなくなる。このことは次のようにして説明できる。定常状態でも，勿論反転層内の少数キャリアの数はゲート電



第15-12図　ガード電極を付けた場合の$V_c - T_s$特性，挿入図は試料形状
● $V_{gr}=0$V，○ $V_{gr}=-10$V

極の周りから流入する少数キャリア数によって制限を受ける。その場合，もし，温度上昇に伴なって増加する少数キャリアの電荷密度の割合が，ゲート電極下よりもその周りで大きいならば，少数キャリアは拡散によってゲート電極下に流入することになる。ゲート電極部の反転層にさらに多数の少数キャリアが蓄積されると，ゲート電位 V_g は押し上げられるが，この効果はゲート電極下とその周りの電位差が小さいときに顕著となる。以上のことから，$V_{gr}=-10$ Vとした時には，少数キャリアの流入も少なく前述の現象がみられなくなったものと考えることができる。

n型試料の場合には少数キャリアはP型であり，P型の場合のようなゲート電極周囲からの流入は考えられない。しかし，Cの部分は初期状態を反転層とした場合と蓄積層とした場合の二通りで見られる。V_b を界面状態が反転状態となるように選んだ場合には，低温での V_{co} を印加する時点ですでに界面に少数キャリア（正孔）が存在している。そして，V_{co} を印加した直後から，P型試料の場合と同様に，この正孔と準位の電子が再結合をする（第15-3図 cとd）。このような場合には，V_b によって正孔の量は制限されるから，得られる結果は $V_c \fallingdotseq V_b$ となる。V_b を蓄積層となるように印加した場合でも，$(V_b - V_{co})$ $(>40\ V)$ を大きくするとCの部分が観測される。第15

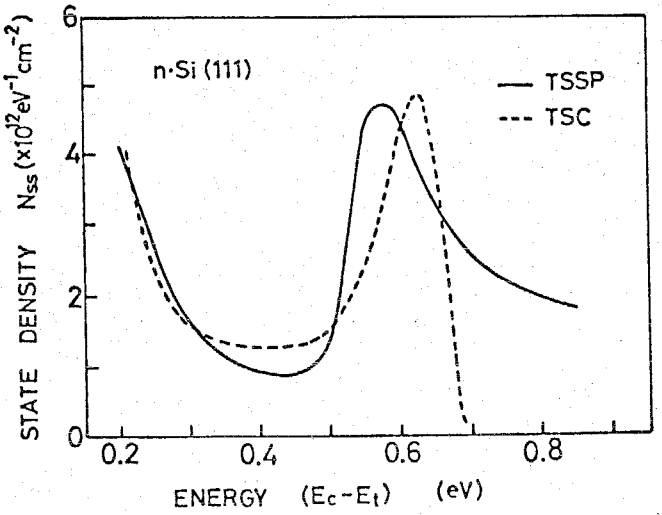


第15-13図
n型試料に対する $(V_b - V_{co})$ が大きい条件でのTSSP
• T_s
↑ T_s より低温におけるTSSPの折れ曲がり温度

インピーダンス法は原理的に定常状態における測定であり，測定結果に非定常な要素が入ると誤差を生じる。非定常状態下での測定であるＴＳＳｐ法では原理的にこのような問題はなく，基本的な相違点である。具体的な測定量についてみると，エネルギーの決定はインピーダンス法の場合，通常容量から間接的に求めるのに対し，ＴＳＳｐ法の場合は温度から求める点で直接的と言える。また，測定できるエネルギー範囲はＴＳＳｐの場合，本実験で大体０．２～０．８ｅＶであり，これはインピーダンス法のうちで測定範囲の広い低周波容量法などとほぼ同等である。しかも容量法の場合，バンド端に近づくと測定精度が下がるという難点があるが，ＴＳＳｐ法は特にこのような問題はない。

次に，同じ熱刺激測定であるＴＳＣとＴＳＳｐとを比較してみる。まず端的に異なる点はＴＳＣは閉回路測定，ＴＳＳｐは開回路測定であることである。閉回路の場合，ゲート電極電荷および絶縁膜にかかる電位差は１回の測定中一定に保たれるが，開回路の場合は刻々変化する。すなわち，（１５－１）式を温度で微分しても dQ_g/dT は零でなく，（１５－３）式の V_i も温度の関数となる。このため解析が困難となり，通常 dQ_s/dT を小さいとする近似を用いなければならない。

最後に，ＴＳＳｐ法とＴＳＣ法を実際に比較した例を示す。ＴＳＣによるエネルギー分布の評価はＳｉｍｍｏｎｓ氏らの方法によった。第１５－１５図はその結果で，図中の実線がＴＳＳｐ法，点線がＴＳＣ法である。両者の形はよく似ているが，ＴＳＣから求めた分布は０．６５ｅＶ付近で急激に減衰している。このＴＳＣの結果は，$V_b = 0$ Ｖ，$V_{c0} = -13$ Ｖ（ＴＳＣ測定中は印加したままとする。）として得られたＴＳＣ



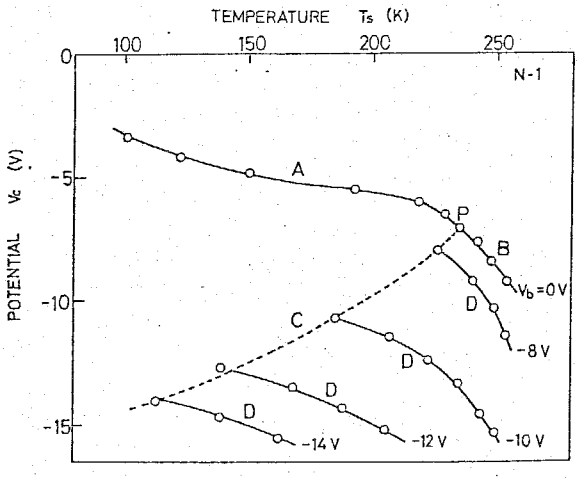
第１５－１５図　ＴＳＳｐ法とＴＳＣ法によるエネルギー分布の比較（Ｎ－１）

－１３図にＴＳＳＰの測定例を示したが，図中点線で表わした曲線にＣの部分が見られている。V_{co}が－６０と－６５Ｖの場合を除けば，他の点線で示した曲線は温度T_sより低温部で折れ曲がりを生じている。さらに，V_{co}が－４０から－５０Ｖの場合には，Ａの部分に相当する実線で示したＴＳＳＰ曲線と交叉している。このような現象は第１５－６図のように$(V_b - V_{co})$が小さい場合には見られないことから，高電界のもとでの少数キャリアの発生つまりトンネル効果やなだれ現象によるものであると考えられる。実験での結果は，試料の不純物濃度が$10^{15}\,cm^{-3}$程度と低いことからトンネル効果は考えにくく，なだれによるものと見られる。それはｅｄｇｅ効果を考えるならば，半導体表面の電位ψ_sが２０Ｖ程度であれば起こり得るからである。V_{co}が－６０Ｖと－６５Ｖの場合を見ると，$-V_c$は急激に大きくなるのにもかかわらずT_sはほとんど一定で，このV_cが界面でフェルミレベルが価電帯に達する時のバイアスに相当しているとみられよう。

今までに述べた以外の特異な現象も観測された。それは第１５－４図に示したＤの部分である。同様の結果はｐ型試料でがード電極を設けたものについても見られている。いずれも１５－３節で述べた簡便法を用いて$V_c \sim T_s$特性を測定した場合に見られ，Ｃの部分のT_sを得た後の特性である。このような現象もおそらくｓｕｒｆａｃｅ ｇｅｎｅｒａｔｉｏｎの機構によるものとみられるが，Ｂの部分よりも低温で起きており明確なことはわからない。

<１５－６－２>ＴＳＳＰ測定法の特徴および他の方法との比較

ＴＳＳＰ法の特徴を他の方法，ここではインピーダンス法と熱刺激電流（ＴＳＣ）法と比較し検討する。



第１５－１４図　ｎ型試料の$V_c - T_s$特性でのＤ部分

曲線より換算したものである。従って，最も深い準位はバイアス条件で制限されるため，前述のように０．６５ｅＶ付近で急激な減少となっている。

以上のように，ＴＳＳＰはＭＩＳ界面準位の測定に関して優れた方法であると言える。なお熱刺激測定の場合，現状では離脱周波数はエネルギーによらないとし，また半導体のドーピング濃度も一様と仮定しているが，これらの仮定が妥当でない場合には結果に誤差を生ずると考えられ，検討が必要であろう。そして，半導体のドーピング濃度の分布が問題となるような場合には，第１４章で述べたホッピング数値計算法によるQ_sとΨ_sの理論曲線の数値解析が役立つであろう。

１５－７　まとめ

ＴＳＳＰを用いたＭＩＳ界面準位についての測定法を述べたが，ＴＳＳＰは界面が不平衡な状態から平衡状態へ移行する過程を観測する方法の一つであり，絶縁体－半導体界面の現象を直接的に観察できる方法である。本論文で述べたＴＳＳＰ法の特徴をまとめると次のようになる。

（１）ＴＳＳＰは開回路測定であり，ゲート電極電荷および絶縁膜にかかる電位差は測定中一定であるとみなせ，解析が閉回路の場合に比べて簡略化される。

（２）開回路における電位測定のため雑音の影響を受けにくく，安定な測定が容易に行なえる。

（３）界面準位の密度およびそのエネルギー分布，キャリアの寿命などが広いエネルギー範囲にわたって評価できる。

（４）界面が不平衡な状態から緩和していく過程の種々の機構について調べることができる。

以上のように多くの利点を合わせ持つＴＳＳＰは，今後とくにＴＳＳＰ曲線自身の解析などにより，上記（４）項の点などについてより詳細な検討を行なう必要があろう。

第16章　結論

本研究で得られた結果について要約する。本論文は誘電体で空間電荷を形成する荷電粒子の挙動についてホッピング数値計算法を提案し，物性的立場および工学的応用の立場から述べたものであり，拡散と空間電荷電界のもとでのドリフトによって定まる電導現象について総合的に論じた。以下では，各章を追いながら得られた結果を整理する。

（i）ホッピング数値計算法による誘電体中の空間電荷特性の解析法に関する研究　絶縁体中の可動イオンによる空間電荷分極は，イオンの拡散とポアソンの式で定まる空間電荷電界のもとでのドリフトを考慮して扱わねばならないが，従来のイオンホッピングモデルの説明に用いられている取扱いを基盤とし，これを電極間の試料全体に拡張したモデルで解析する方法によって取扱うことができる。このモデルでホッピング距離ℓが無限小の場合には連続量で記述する式と基本的に一致するので電子伝導現象も扱かえる。また，電荷の遷移を基盤としているので二次元への拡張も容易である。さらにホッピング数値計算法は境界条件や種々の物理現象を簡単に式中に代入して解析できる方法である。

（ii）イオン空間電荷分極の定常および過渡解析の研究（第3～5章）

（1）ホッピング数値計算法を用いれば，絶縁体中のイオン空間電荷分布や電位分布などの空間電荷特性を求められる。（2）換算計算を行なえば厚い膜も同様に扱かえる。（3）可動イオンによる過渡電流やその空間電荷の変動過程を容易に解析できる。（4）過渡電流のピークの発生は試料内に過剰の電荷が存在し，それが空間電荷電界の形成に関与しているときに限られる。（5）換算計算により厚い膜に対しても過渡解析が行なえる。（6）実験値と計算値を対応させるとホッピング距離やイオンの移動度などの物性定数を評価できる。

（7）PET試料の過渡電流に適用して試料の物性定数を評価した。（8）ホッピング数値計算法の基本式を用いれば，イオン空間電荷分極による緩和時間などについて解析できる。

（iii）絶縁体中の電子伝導現象の研究（第6～8章）（1）ホッピング数値計算法によれば拡散も考慮して空間電荷制限電流の解析が行なえる。（2）拡散を考慮すると注入電極界面で電荷密度が無限大となるようなことはないが，得られる電流電圧特性は従来報告されているものとほぼ同じである。（3）吸収電流測定とホッピング数値計算法を組み合わせると絶縁膜フィルムの空間電荷特性を評価できる。（4）（3）の計算によりフィルムの実効移動度や注入電極界面の電界と電流の関係を求められる。（5）（4）の結果をもとにして厚さの異なるフィルムの空間電荷特性を評価できる。（6）以上の結果からケーブル絶縁体中の空間電荷特性も評価でき，ケーブルの絶縁設計も行なえる。（7）ホッピング数値計算法によれば，過渡空間電荷制限電流も解析できる。その結果，拡散の効果は初期電流特性に現われることなどが明らかとなった。（8）電荷減衰現象に適用し，交叉現象が拡散とドリフトのみである程度説明できることを示した。

（iv）空間電荷分極による誘電分散の研究（第9，11章）（1）ホッピング数値計算法の基本式よりクラマース・クローニッヒの関係を導くことができる。（2）低周波領域で誘電率の大きくなる現象やバイアス電圧によって分散曲線の変位する特徴が同計算法で説明できた。（3）空間電荷分極の誘電分散現象の解析には位相平面の扱かいが有効である。（4）大信号解析によりガルトン効果が説明できる。（5）一般誘電体の場合にもクラマース・クローニッヒの関係を導くことができる。

（v）複合誘電体の誘電分極の研究（第10章）（1）ホッピング数値計

算法によれば，空間電荷と言う立場から複合誘電体を扱かえる。（２）二層誘電体の考え方を多層誘電体に拡張できる。

（Ｖｉ）二次元ポアソン場の数値解析の研究（第１２章）（１）ホッピングモデルを二次元に拡張すれば，拡散と空間電荷電界によるドリフトで定まる空間電荷特性を求められる。具体例として正方形状，凹型試料のイオン空間電荷分布を評価した。（２）ホッピング数値計算法で二次元解析をする場合には，ポテンシャルと電荷の関係を求めなければならないが，それには表面電荷法が利用できる。（３）ホッピングモデルに対する等価回路を考えると遷移マトリクスの合成などが容易となる。（４）等価回路モデルよりユニット単位に拡張すれば有限要素法での考え方をすべて用いることができる。

（Ｖii）イオン空間電荷分極ＴＳＣの研究（第１３章）（１）ホッピング数値計算法によればイオン空間電荷分極ＴＳＣを扱かえる。（２）イオン空間電荷分極ＴＳＣはV_cによりピーク温度が変化することを，ＭＩＳ試料の実験と計算より示し，この結果を用いれば試料の物性定数が評価できることを明らかにした。（３）イオン空間電荷分極ＴＳＣと双極子ヤトラップによるＴＳＣとの違いを明確にした。

（Ｖiii）ＭＩＳ構造素子の空乏層解析の研究（第１４章）（１）ホッピング数値計算法により半導体の電導現象を扱かえる。（２）ホッピング数値計算法では，等価回路も作り易くまた直観的に現象を扱かえる。（３）種々の不純物濃度分布を持つ場合も容易に解析できる。

（ＩＸ）ＴＳＳｐによるＭＩＳ界面準位の測定法に関する研究（第１５章）（１）ＴＳＳｐは開回路測定であり，ゲート電極電荷および絶縁膜にかかる電位差は測定中一定で，解析が閉回路の場合に比べて簡単である。（２）開回路

測定のため，安定な測定が行なえる。（３）界面準位の密度およびエネルギー分布などが広いエネルギー範囲で評価できる。（４）界面が不平衡な状態から平衡な状態へ緩和してゆく過程の種々の機構を調べることができる。

以上，簡単に整理したが，ホッピング数値計算法は今迄繰返し述べてきたように，電導現象を解析するための基本的な方法と考えられる。そして，電気・電子工学上の多くの問題は，この電導現象によって扱かえるであろうから，本研究はそれらの基礎としてさらに進展することが予想される。また，本研究はそれらの研究の基礎として役立つであろう。

謝　辞

本論文を終わるにあたり，長い間にわたって終始懇切な御指導と暖かい激励をして下さいました日野太郎教授に深く感謝の意を表わします。また，山中俊一教授，野村昭一郎教授，高橋清教授，直江正彦助教授，阿部正紀助教授および各研究室の皆様には日頃いろいろと御世話になりました。厚く御礼申し上げます。本研究を行なうに際しては，研究室の山下建助手，金子双男助手には一部共同研究を含め有益な討論をして頂きました。また，電力ケーブルに関しては昭和電線電纜株式会社電力研究開発部高圧研究室の相原貢室長並びに同研究室の丹田修氏より有益な御助言を頂きました。さらに，数値解析法については機械工学科大学院博士課程学生川島康氏に有益な御助言を頂きました。これらの方々に厚く御礼申し上げます。加えて，本研究を遂行するにあたっては，清田久晴技官，三田幸男技官をはじめとする研究室の諸氏には多くの御助力を頂きました。ことに，共に研究を行なった大学院学生吉川正人君，学部学生山田洋史君にはプログラムの開発や解析についての検討をして頂きました。これらの皆様にも深く感謝いたします。

付 録 1. 差分法とホッピング法の比較

差分法とは，現象を記述する微分方程式および境界条件を差分近似式で置き換え差分方程式を作成して数値解析する方法で，微分方程式が解析的に扱かえない場合に行なわれる一般的な解析手段である。そこで，絶縁体中の電導現象に対する差分法の扱いを以下で示し，本論文でのホッピング法との比較をする。

1. 一次元の電導現象に対する差分方程式の作成法について

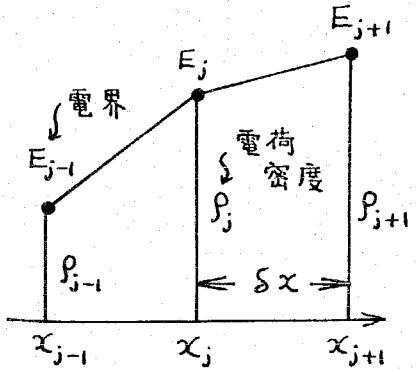
ここで扱かう絶縁体中の電導現象は，次の微分方程式で記述されるとする。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}\left(\mu E \rho - D\frac{\partial \rho}{\partial x}\right) \cdots\cdots (付1-1)$$

$$\frac{\partial E}{\partial x} = \frac{\rho}{\varepsilon} \cdots\cdots (付1-2)$$

ただし，ρ, Eは各位置の電荷密度，電界で，Dは拡散定数，μは移動度，εは試料の誘電率である。

差分法では，上記（付1－1），（付1－2）式より差分方程式を作成するが，その場合の未知数は各位置x_jにおける電荷密度および電界で，各区間ではそれらの量は通常線型近似できるものとする。（付1－1図参照）そして，各位置の電荷密度および電界を関連づけることによって差分方程式が作られる。



付1－1図差分近似

ここで，未知数が各位置での電荷密度であることはホッピング法との比較において注意しておく必要がある。以下の解析では簡単のために各区間の長さをδx（＝一定）とし，D, μ, εも一定とする。このように仮定すれば，おおよそ次の二通りの差分方程式を作成することができる。

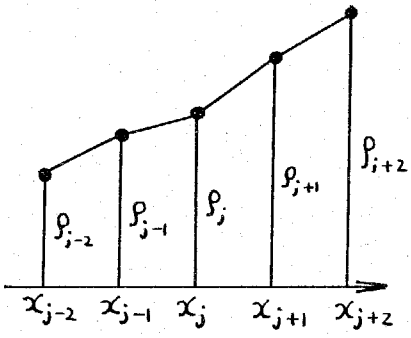
＜1－1＞ 差分方程式 その1

（付1－2）式を（付1－1）式に代入し，式を整理すれば，

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D\frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} - \frac{\partial}{\partial x}\mu E \rho = D\frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} - \mu E \frac{\partial \rho}{\partial x} - \mu \frac{\partial E}{\partial x}\cdot \rho$$

$$= D\frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} - \mu E \frac{\partial \rho}{\partial x} - \frac{\mu}{\varepsilon}\rho^2 \qquad \cdots\cdots (付1-3)$$

付1－2図を参照して，$\partial^2\rho/\partial x^2$，$\partial\rho/\partial x$ を次のように近似する。



$$\begin{cases} \dfrac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} \longrightarrow \dfrac{1}{\delta x}\left(\dfrac{\rho_{j+1}-\rho_j}{\delta x} - \dfrac{\rho_j - \rho_{j-1}}{\delta x}\right) \\ \dfrac{\partial \rho}{\partial x} \longrightarrow \dfrac{1}{\delta x}(\rho_{j+1}-\rho_j) \end{cases}$$

付1－2図　差分近似　　$\cdots\cdots$ (付1－4)

ただし，(付1－4)式では前進差分式[*1]を用いている。従って，(付1－4)式を(付1－3)式に代入して，

$$\frac{\partial \rho_j}{\partial t} = D\frac{\rho_{j+1} - 2\rho_j + \rho_{j-1}}{\delta x^2} - \mu E_j \frac{\rho_{j+1}-\rho_j}{\delta x} - \frac{\mu}{\varepsilon}\rho_j^2$$

$\cdots\cdots$ (付1－5)

なる差分方程式が得られる。

＜1－2＞差分方程式　その2

差分方程式を作成する場合，(付1－1)式を

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\partial J}{\partial x} \quad \cdots (付1-6), \quad J = \mu E \rho - D\frac{\partial \rho}{\partial x} \cdots (付1-6)$$

と考え，これから差分式を作る。(付1－6)式に後退差分式[*2]を用いれば，

$$\frac{\partial \rho_j}{\partial t} = -\frac{J_j - J_{j-1}}{\delta x} \qquad \cdots\cdots (付1-8)$$

また，(付1－7)式より前進差分式を用いて，

$$J_j = \mu E_j \rho_j - D\frac{\rho_{j+1}-\rho_j}{\delta x} \qquad \cdots\cdots (付1-9)$$

*1,2 前進差分式では　$\dfrac{\partial \rho}{\partial x} \longrightarrow \dfrac{\rho_{j+1}-\rho_j}{\delta x}$　とするが，

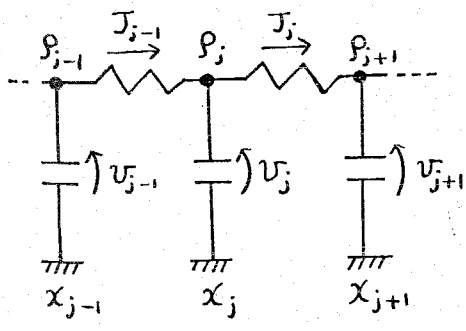
後退差分式では　$\dfrac{\partial \rho}{\partial x} \longrightarrow \dfrac{\rho_j - \rho_{j-1}}{\delta x}$　とする。

従って，（付1－8），（付1－9）式より

$$\frac{\partial \rho_j}{\partial t} = \frac{\mu E_{j-1}\rho_{j-1} - D\dfrac{\rho_j - \rho_{j-1}}{\delta x}}{\delta x} - \frac{\mu E_j \rho_j - D\dfrac{\rho_{j+1} - \rho_j}{\delta x}}{\delta x} \quad \cdots\cdots（付1－10）$$

ただし，（付1－8）式で後退差分式，（付1－9）式で前進差分式を用いたのは，（付1－10）式で $x_j - 1$，x_j，$x_j + 1$ の成分で表わすためである。

以上のようにして差分方程式を作成することができたが，<1－1>，<1－2>で見られるように微分方程式を出発点とし，その式に対して変形を加えたり，あるいは直接に差分近似式を代入して得られるもので，その段階は形式的操作に委ねられている。従って，上記の二例にみられたように差分の仕方により，これら以外にも種々の差分方程式が得られることになる。また，（付1－5）式で表現された差分式の第2，3項目にみられるように，物理的に不明確な項が現われる場合がある。これは，微分方程式上での変形が現象とは切り離された数学上の手続によるためであると考えられる。以上より，差分方程式は各位置における電荷密度の関係を結びつけるもので，現象と式が一体化しているとは言い難い。そのために x_j の位置から x_{j+1} の位置の方向に流れる電流は（付1－9）式で示されるように，x_j と x_{j+1} の位置の電荷密度を結ぶ関係式の等価表現ということになる。この意味において，差分方程式で記述された式から等価回路を表わせば，電荷の挙動という現象的な枠をはずれ，形式的な位置と位置とを結ぶ表現となる。従って，その等価回路を下図のように伝導と拡散を示す抵抗および空間的に電荷が蓄積される効果を示す容量から，付1－3図のように表わすのが妥当であろう。そのために付1－3図より直接電流の基本式を作成することは困



付1・3図　等価回路

難である。一方，ホッピング法は密接に等価回路と基本式が結びついている。これは同方法が方程式を直接に現象より導くためである。

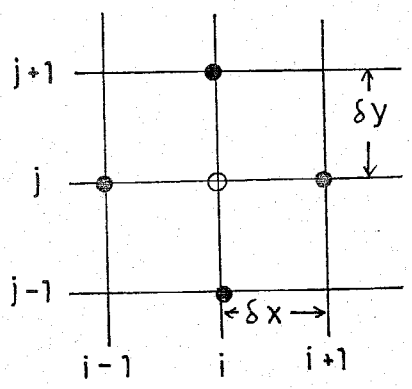
2．二次元の電導現象に対する差分方程式の作成法について

微分方程式では対象とする材料の形状が異なる場合には座標系を変換して考える。そこで以下では代表的なx－y座標系及びr－θ座標系についての二次元問題を考えてみる。

<2・1>x－y座標系における差分方程式

x－y座標系での電流連続を表わす微分方程式は，

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\partial^2 J}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 J}{\partial y^2} = -\frac{\partial J_x}{\partial x} - \frac{\partial J_y}{\partial y} \qquad \cdots\cdots (付1-11)$$



付1－4図

x－y座標系における差分方程式の作成

であるから，付1－4図を参照して(x_i, y_j)における x方向への電流J_xを$J_{(i,j),(i+1,j)}$として差分方程式を作成すれば，

$$\frac{\partial \rho_{i,j}}{\partial t} = \frac{1}{\delta x}\left(J_{(i-1,j),(i,j)} - J_{(i,j),(i+1,j)}\right) + \frac{1}{\delta y}\left(J_{(i,j-1),(i,j)} - J_{(i,j),(i,j+1)}\right) \qquad \cdots\cdots (付1-12)$$

ただし，i，jの添字は(x_i, y_j)の座標を表わしている。

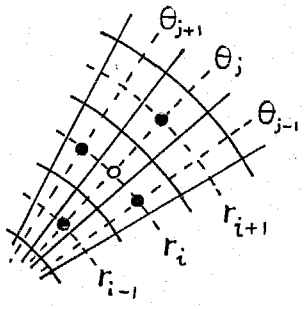
<2・2>r－θ座標系における差分方程式

r－θ座標系での電流連続を表わす微分方程式は，

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\partial^2 J}{\partial r^2} - \frac{1}{r}\frac{\partial J}{\partial r} - \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 J}{\partial \theta^2}$$

$$= -\frac{\partial J_r}{\partial r} - \frac{1}{r}J_r - \frac{1}{r^2}\frac{\partial J_\theta}{\partial \theta} \qquad (付1-13)$$

そこで，付1－5図を参照して(r_i, θ_j)における差分方程式を作成すれば，



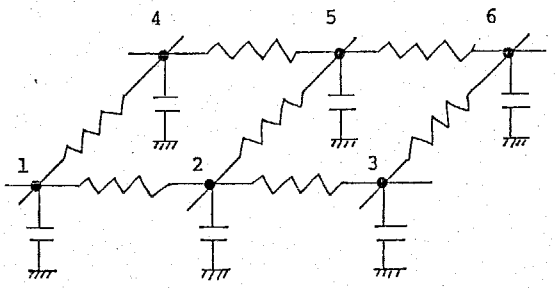
付1－5図　r－θ座標系における差分方程式の作成

（付1－13）式より，

$$\frac{\partial \rho_{i,j}}{\partial t} = -\frac{J_{(i,j),(i+1,j)} - J_{(i-1,j),(i,j)}}{\delta r} - \frac{J_{(i,j),(i+1,j)}}{r_{i,j}} - \frac{1}{r_{i,j}^2 \delta\theta_j}\left(J_{(i,j),(i,j+1)} - J_{(i,j-1),(i,j)}\right) \quad \cdots\cdots (付1-14)$$

ただし，i，j の添字は（r_i，θ_j）の座標，$J_{(i,j),(i+1,j)}$ は（r_i，θ_j）より（r_{i+1}，θ_j）方向への電流を表わしている。

以上，＜2－1＞，＜2－2＞で得られた差分方程式（付1－12），（付1－14）式を比較すれば，方程式の形が変化していることがわかる。このように差分法は微分方程式を差分近似して得る方法であり，微分方程式が座標系によって変化するのに呼応して差分方程式も変化する。一方，ホッピング法は座標系により方程式の形が変化しないことをすでに述べている*。このように両者の方法には大きな差があることがわかる。また，差分方程式における等価回路は，付1－3図の拡張された形として付1－6図のように示される。この等価回路も一次元の場合と同様に差分方程式と一体化していると言い難く，この回路から直接差分方程式を組み立てることは困難であろう。



付1－6図　二次元の差分方程式の等価回路

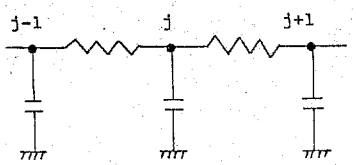
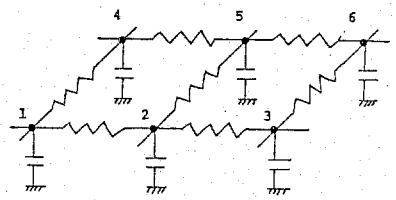
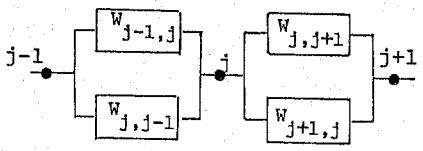
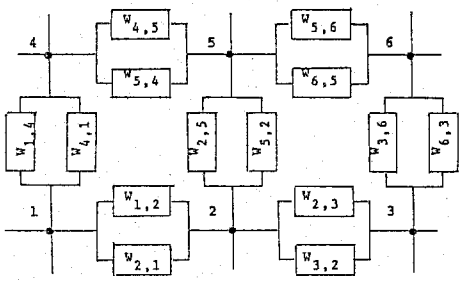
さらに微分方程式は極限における電導現象の表現であり，その意味でr－θ座標系での（付1－13）式は $r \to 0$ の場合にも意味がある。一方，この式に代する（付1－14）式の差分式は $r_{i,j} = 0$ の場合には意味がない。そのために $r_{i,j} = 0$ の場合については別の差分式で考えなければならない。このように微分方程式の差分近似は必ずしも現象を適切に表現してい

ることは言い難い。

以上のような観点から差分法とホッピング法を比較すれば付1－1表のように整理される。

付1－1表　差分法とホッピング法の比較

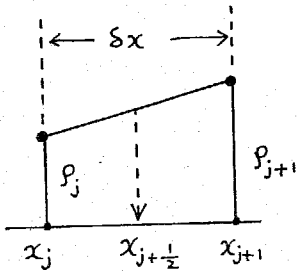
番号	項目	差分法	ホッピング法
	未知数	○各位置（無限小区間）における電荷密度 ρ_i	○分割された領域内の電荷数 Q_i
2	方程式の基本構造	○座標系により変化する。 例えば 1次元の場合 1, x-y 座標系 $\frac{\partial \rho_{i,j}}{\partial t} = \frac{1}{\delta x}\left(J_{(i-1,j),(i,j)} - J_{(i,j),(i+1,j)}\right)$ $- \frac{1}{\delta y}\left(J_{(i,j-1),(i,j)} - J_{(i,j),(i,j+1)}\right)$ 2, r-θ 座標系 $\frac{\partial \rho_{i,j}}{\partial t} = - \frac{J_{(i,j),(i+1,j)} - J_{(i-1,j),(i,j)}}{\delta r}$ $+ \frac{J_{(i,j),(i+1,j)}}{r_{i,j}} - \frac{1}{r_{i,j}^2 \delta\theta_j}\left(J_{(i,j),(i,j+1)} - J_{(i,j-1),(i,j)}\right)$	○座標系によらない 例えば 二次元の場合 x-y 座標系でも r-θ 座標系でも $\frac{dQ_{i,j}}{dt}$ $= \omega_{(i,j+1),(i,j)} Q_{i,j+1} - \omega_{(i,j),(i,j+1)} Q_{i,j}$ $+ \omega_{(i+1,j),(i,j)} Q_{i+1,j} - \omega_{(i,j),(i+1,j)} Q_{i,j}$ $+ \omega_{(i,j-1),(i,j)} Q_{i,j-1} - \omega_{(i,j),(i,j-1)} Q_{i,j}$ $+ \omega_{(i+1,j),(i,j)} Q_{i+1,j} - \omega_{(i,j),(i+1,j)} Q_{i,j}$
3	電荷密度	○各位置の未知数より直接求められる。	○各位置の電荷密度 ρ_i を求めるためには，未知数 Q_i を領域 V_i で割る。 $\rho_i = Q_i / V_i$
4	任意形状の試料に対する扱い	○形状により座標系を変えて扱う場合は厄介である。座標系を変えない場合は非較的容易	○方程式の基本構造は 扱う形状により変化しないので容易
5	多次元への拡張	○座標系により異なり厄介である。	○遷移を表わす項を付加するのみである。

6	等価回路 ○ 一次元 ○ 二次元 ○ 特　徴	  ○座標系の変化は等価回路上では抵抗Rの変化として表現される。 ○等価回路はRとCで表現される。	  ○座標系の変化は等価回路上の未知数に反映され，$\omega_{j,j+1}$，$\omega_{j+1,j}$の基本的性質は変化しない。 ○等価回路はダイオードで表現される。
7	その他の特徴	○一つの座標系でも差分近似の仕方により種々の方程式が得られる。 例，一次元 $\frac{\partial \rho_j}{\partial t} = D\frac{\rho_{j+1}-2\rho_j+\rho_{j-1}}{\delta x^2} - \mu E_j \frac{\rho_{j+1}-\rho_j}{\delta x} - \frac{\mu}{\varepsilon}\rho_j^2$ $\frac{\partial \rho_j}{\partial t} = \frac{\mu E_{j-1}\rho_{j-1} - D\frac{\rho_j-\rho_{j-1}}{\delta x}}{\delta x} - \frac{\mu E_j \rho_j - D\frac{\rho_{j+1}-\rho_j}{\delta x}}{\delta x}$ などがある。	○一つの座標系のある分割に対しては作成される基本方程式は一通り $\frac{dQ_j}{dt} = \omega_{j-1,j}Q_{j-1} - \omega_{j,j-1}Q_j + \omega_{j+1,j}Q_{j+1} - \omega_{j,j+1}Q_j$

付　録　Z.　差分法からみたホッピング法

差分法という立場からホッピング法を考えることにより，ホッピング法の数値解析としての精度を考える。

$J=\mu E\rho - D\partial\rho/\partial x$ の差分近似式を求めるときに，付Z－1図のように x_j と x_{j+1} の中間の位置で電流を考えれば，



付Z－1図　差分近似式の作成
差分法における各位置の諸量

$$J_{j+\frac{1}{2}}=\mu E_{j+\frac{1}{2}}\frac{\rho_j+\rho_{j+1}}{2}-D\frac{\rho_{j+1}-\rho_j}{\delta x}$$

$$=\frac{D}{\delta x}\left(1+\frac{q}{kT}E_{j+\frac{1}{2}}\cdot\delta x\right)\rho_j$$

$$-\frac{D}{\delta x}\left(1-\frac{q}{kT}E_{j+\frac{1}{2}}\cdot\delta x\right)\rho_{j+1}$$

……（付Z－1）

となる。ただし，$\mu=qD/KT$ なるEinsteinの関係を用いている。（付Z－1）式を用いて，x_j 点における電流連続の式 $\partial\rho/\partial t=-\partial J/\partial x$ の差分近似式を求めると，

$$\frac{\partial\rho_j}{\partial t}=\frac{D}{\delta x^2}\left(1+\frac{q}{kT}E_{j-\frac{1}{2}}\cdot\delta x\right)\rho_{j-1}-\frac{D}{\delta x^2}\left(1-\frac{q}{kT}E_{j-\frac{1}{2}}\cdot\delta x\right)\rho_j$$

$$+\frac{D}{\delta x^2}\left(1-\frac{q}{kT}E_{j+\frac{1}{2}}\cdot\delta x\right)\rho_{j+1}-\frac{D}{\delta x^2}\left(1+\frac{q}{kT}E_{j+\frac{1}{2}}\cdot\delta x\right)\rho_j$$

……（付Z－2）

となる。（付Z－1），（付Z－2）式の電荷密度 ρ_j の係数は，ホッピング法で導かれた遷移確率項の一次展開近似式と一致していることがわかる。このことから，一次元におけるホッピング法の計算精度を連続モデルに対する近似度という意味で，他の差分式と比較して評価できる。そのために，まず差分分割点のとり方と一階微分近似度の関係について調べる。

いま付Z－2図の分割点配置について，j番目の分割点における電荷密度関

数ρの一階微分に対する差分近似式を作るものとする。まず考えられる最も簡単な方法は，jと$j+1$番目の関数値を用いて，

$$\rho_j' \fallingdotseq (\rho_{j+1} - \rho_j)/\delta x \qquad \cdots\cdots (付ス-3)$$

とすることであろう。この近似がどの程度よいかを知るために，ρ_{j+1}をj点の近傍でTaylor展開する。その結果は，

$$\rho_{j+1} = \rho_j + \rho_j'\delta x + \frac{\rho_j''}{2}\delta x^2 + \frac{\rho_j'''}{6}\delta x^3 + \frac{\rho_j^{(4)}}{24}\delta x^4 + \cdots$$

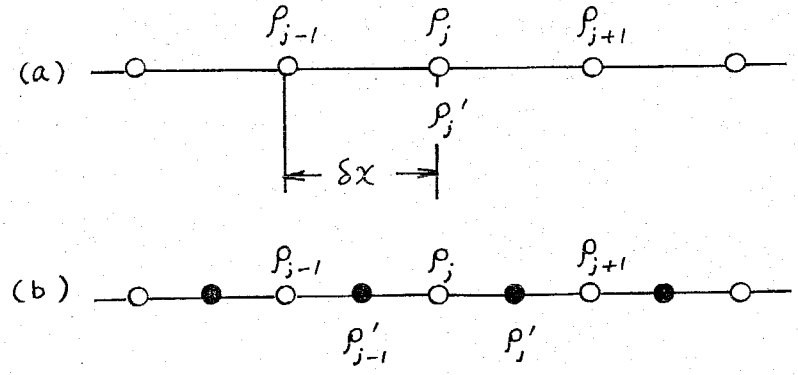
$$\cdots\cdots (付ス-4)$$

である。この式からρ_j'を求めれば，

$$\rho_j' = \frac{\rho_{j+1} - \rho_j}{\delta x} - \frac{\rho_j''}{2}\delta x - \frac{\rho_j'''}{6}\delta x^2 - \cdots\cdots$$

$$\cdots\cdots (付ス-5)$$

となる。(付ス-3)，(付ス-5)式を比較すればわかるように，(付ス-3)式の近似式ではδxについて一乗の項が省略されている。



付ス-2図
近似式の説明図

次に付ス-2図(a)において，

$$\rho_j' \fallingdotseq \frac{\rho_{j+1} - \rho_{j-1}}{2\delta x} \qquad \cdots\cdots (付ス-6)$$

としてみる。この式の近似度を知るためにρ_{j-1}をTaylor展開で表わせば，

$$\rho_{j-1} = \rho_j - \rho_j'\delta x + \frac{\rho_j''}{2}\delta x^2 - \frac{\rho_j'''}{6}\delta x^3 + \frac{\rho_j^{(4)}}{24}\delta x^4 - \cdots$$

・・・・・（付え－7）

となる。（付え－4），（付え－7）式の差をとり，（付え－6）式に対応する結果を求めると，

$$\rho_j' = \frac{\rho_{j+1} - \rho_{j-1}}{2\delta x} - \frac{\rho_j'''}{6}\delta x^2 - \cdots$$

・・・・・・（付え－8）

となり，（付え－6）式で省略されている最大の項はδx^2の程度である。従って，（付え－6）式は（付え－3）式より一次だけすぐれた近似度を持つ式である。

次に，付え－2図（b）のようにjとj＋1の中点$j+\frac{1}{2}$を定め，関数ρの微分量をこの中点で定義するものとすれば，一階微分に対する差分近似は，

$$\rho_{j+\frac{1}{2}}' = \frac{\rho_{j+1} - \rho_j}{\delta x}$$

・・・・・・（付え－9）

となる。前と同じ要領で，これに対応するTaylor展開式を示せば，

$$\rho_{j+\frac{1}{2}}' = \frac{\rho_{j+1} - \rho_j}{\delta x} - \frac{\rho_j'''}{24}\delta x^2 - \cdots$$

・・・・・・（付え－10）

となる。（付え－8）と（付え－10）式を比較すれば，両方ともδx^2の近似度であるが，（付え－10）式の方が4倍すぐれている。

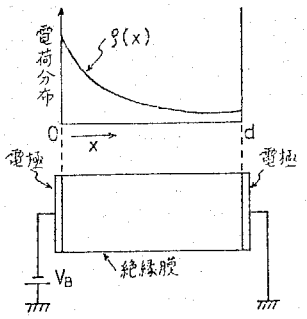
以上より，ホッピング法における電流Jの近似度は（付え－1）式で示され，これは差分近似式という立場からみると中点で微分量を定義する最も連続量に対する近似度のよい計算法と言うことができる。

付 録 3. 連続モデルによる絶縁体中の電荷分布の計算法

絶縁体中に正の過剰イオンが存在し，電極面がこのイオンに対してブロッキングである場合，膜の厚さ，印加電圧，可動イオンの総量，温度を既知のものとして定常状態の電荷分布を求めるための解析を示す。

<3・1> 電界

付3・1図のように，両端に金属電極を持つ絶縁体内部の厚さ方向にx軸をとり，イオン濃度を$\rho(x)$，絶縁体内部に形成される電界を$E(x)$，電位を$V(x)$，可動イオンの総電荷量をQ_tで表わす。このとき，絶縁体内部のxの位置で時間tにおけるイオン電流$I(x,t)$は，イオンの移動度をμ，拡散定数をDとして（付3-1）式で示される。



付3-1図 絶縁膜内部の電荷分布

$$I(x,t)=\mu E(x,t)\cdot\rho(x,t)-D\frac{\partial\rho(x,t)}{\partial x} \quad \cdots\cdots(付3-1)$$

いま定常状態を考えれば，絶縁膜中には電流は流れず，$I(x,t)$は零となり，

$$\mu E(x)\cdot\rho(x)=D\frac{d\rho(x)}{dx} \quad \cdots\cdots(付3-2)$$

一方，絶縁膜の誘電率をεとしてポアソンの式

$$\frac{dE(x)}{dx}=\frac{\rho(x)}{\varepsilon} \quad \cdots\cdots(付3-3)$$

とアインシュタインの関係，

$$D=\mu kT/q \quad \cdots\cdots(付3-4)$$

ここに，k：ボルツマン定数，T：絶対温度，q：イオンの電荷を（付3-2）式に適用して，

$$\frac{kT}{q}\frac{d^2E(x)}{dx^2} = E(x)\frac{dE(x)}{dx} \qquad \cdots\cdots (付3-5)$$

上式を積分して，

$$\frac{2kT}{q}\int \frac{1}{E(x)^2+C_1}\,dE(x) = x \qquad \cdots\cdots (付3-6)$$

ただし，C_1は積分定数を表わす。

この（付3－6）式を解けば絶縁膜内部の各位置における電界が求められるが，そのためには定数C_1と右辺を積分することによって表われる積分定数とを決める必要がある。この二つの未知数を決定するための条件は，絶縁膜中の可動イオンの総量がQ_tであること，および電極間に加える電圧がV_Bであることで，膜の厚さをdとして次式で与えられる。

$$\int_0^d \rho(x)\,dx = Q_t \qquad \cdots\cdots (付3-7)$$

$$\int_0^d E(x)\,dx = V_B \qquad \cdots\cdots (付3-8)$$

以上得られた式を用いて（付3－6）式の定数C_1の大きさにより，（1）$C_1>0$の場合，（2）$C_1=0$の場合，（3）$C_1<0$の場合に分けて電界$E(x)$を求める。なお，ここでは付3－1図に示すように$x=0$なる点の電極に$V_B<0$なる電圧が印加された場合を考える。また，$C_1>0$の場合は電荷分布の偏りが小さく，$C_1=0$の場合はその偏りが比較的大きく，$C_1<0$の場合は更にその偏りが大きい場合に相当する。

（1）　$C_1>0$の場合

（付3－6）式の左辺を積分すれば，積分定数をC_2として次式が得られる。

$$\frac{2kT}{q}\left[\frac{1}{(C_1)^{\frac{1}{2}}}\arctan\left\{\frac{E(x)}{(C_1)^{\frac{1}{2}}}\right\}\right]+C_2 = x \qquad \cdots\cdots (付3-9)$$

よって，（付3－9）式から電界$E(x)$は，

$$E(x) = \frac{2akT}{q}\tan(ax+b)$$

ただし，

$$a = \frac{q(C_1)^{\frac{1}{2}}}{2kT}\ ,\quad b = -\frac{q(C_1)^{\frac{1}{2}}}{2kT}C_2$$

}・・（付3－10）

となる。ここで，$C_1 > 0$より$a > 0$となることに留意する。さて（付3－10）式のa，bを（付3－7），（付3－8）式の境界条件より計算して電界E（x）を定めることができる。すなわち，（付3－3），（付3－7），（付3－10）式から

$$Q_t = \varepsilon\{E(d) - E(0)\}$$

$$= \frac{2a\varepsilon kT}{q}\{\tan(ad+b) - \tan b\} \cdots (付3-11)$$

（付3－8）式のE（x）に（付3－10）式を代入して積分すれば，

$$V_B = -\frac{2kT}{q}\ln\frac{\cos(ad+b)}{\cos b} \quad \cdots\cdots (付3-12)$$

（付3－11），（付3－12）式よりaを求めるための関係式を導く。$y = -qV_B/kT$とおけば，（付3－12）式より

$$\exp\left(-\frac{y}{2}\right) = \frac{\cos b}{\cos(ad+b)} \quad \cdots\cdots (付3-13)$$

（付3－11），（付3－13）式から

$$\frac{qQ_t d}{2\varepsilon kT}\sin ad$$

$$= ad\left[\exp\left(-\frac{y}{2}\right) + \exp\left(\frac{y}{2}\right) - 2\cos ad\right]$$

$$\cdots\cdots (付3-14)$$

従って，（付3－14）式から$P = qQ_t d/4\varepsilon kT$とおいて

$$p\frac{\sin ad}{ad}+\cos ad=\cosh\left(\frac{y}{2}\right)\quad\cdots\cdots(付3-15)$$

上記（付３－１５）式よりａの値は定まるが，そのときのｂの値は（付３－１２）式より，

$$b=\tan^{-1}\left[\frac{1}{\sin ad}\left\{\cos ad-\exp\left(\frac{y}{2}\right)\right\}\right]\cdots(付3-16)$$

として定められる。以上，（付３－１５），（付３－１６）式から求めたａ，ｂの値を（付３－１０）式に代入すればＥ（ｘ）が決定する。

（２）　$C_1=0$の場合

（１）項と同様にして，（付３－６）式の左辺を積分し積分定数をC_2とおけば，

$$\frac{2kT}{g}\left\{-\frac{1}{E(x)}\right\}+C_2=x\quad\cdots\cdots(付3-17)$$

よって，（付３－１７）式より電界Ｅ（ｘ）が得られ

$$E(x)=\frac{2kT}{g}\frac{1}{C_2-x}\quad\cdots\cdots(付3-18)$$

となる。この場合においても（付３－７），（付３－８）式からC_2の値を計算できるが，未知数が一つであることを考えれば，いずれか一方を使えばよい。そこで，ここでは（付３－８）式を用いれば次の式が得られる。

$$V_B=\frac{2kT}{g}\ln\frac{C_2}{C_2-d}\quad\cdots\cdots(付3-19)$$

すなわち，

$$C_2=d\Big/\left\{1-\exp\left(-\frac{gV_B}{2kT}\right)\right\}\cdots(付3-20)$$

このC_2を（付３－１８）式に代入すれば電界Ｅ（ｘ）が次のように表わされる。

$$E(x)=\frac{2kT}{g}\cdot\frac{1-\exp\left\{-\frac{g}{2kT}V_B\right\}}{d+x\left\{\exp\left(-\frac{g}{2kT}V_B\right)-1\right\}}$$

・・・・・・（付3－21）

更に後の議論の都合上若干の式を導いておく。すなわち，（付3－11）式に示したように一般にQ_tはE(d)，E(0)を用いて表わせるが，いま（付3－18）式から得られるE(d)，E(0)を用いれば，

$$Q_t = \frac{2\varepsilon kT}{q}\left(\frac{1}{C_2 - d} - \frac{1}{C_2}\right) \cdots\cdots (付3-22)$$

そこで（付3－22）式のC_2を（付3－20）式に代入して整理すれば，

$$\left.\begin{aligned} P + 1 &= \cosh(y/2) \\ P &= \frac{q Q_t d}{4\varepsilon kT}, \quad y = -\frac{q V_B}{kT} \end{aligned}\right\} \cdots\cdots (付3-23)$$

の関係式が得られる。これは（1）項の場合における（付3－15）式の関係式で，adを0に漸近させたときに相当する。

（3）　$C_1 < 0$の場合

この場合も（1）項と同様にして（付3－6）式を積分し，C_2を積分定数として

$$\frac{2kT}{q}\left[\frac{1}{2(-C_1)^{\frac{1}{2}}} \ln\left(\frac{E(x) - (-C_1)^{\frac{1}{2}}}{E(x) + (-C_1)^{\frac{1}{2}}}\right)\right] + C_2 = x$$

・・・・・（付3－24）

の関係が得られる。これを整理すれば

$$\left.\begin{aligned} E(x) &= -\frac{2kTa}{q}\coth(ax - b) \\ \text{ただし，} \quad a &= q(-C_1)^{\frac{1}{2}}/2kT \\ b &= q(-C_1)^{\frac{1}{2}} C_2 / 2kT \end{aligned}\right\} \cdots (付3-25)$$

ここで（1）項と同様に$a > 0$であることに留意する。（1），（2）項の場合と同様にして，（付3－7），（付3－8）式の境界条件を用いれば，a，bの値は定まる。すなわち，$Q_t = \varepsilon E(d) - \varepsilon E(0)$の関係と（付3－25）式から

$$Q_t = \frac{2a\varepsilon kT}{g}\left\{\coth(-b) - \coth(ad-b)\right\}$$

……（付3－26）

また（付3－8）式に（付3－25）式のE（x）を代入し積分すれば，

$$V_B = -\frac{2kT}{g}\ln\left\{\frac{\sinh(ad-b)}{\sinh(-b)}\right\}$$ ・・（付3－27）

が得られる。ただし，（付3－27）式で$\sinh(ad-b)$，$\sinh(-b)$の各値が零となると問題であるが，（1）項で述べたように，電極界面における電界E（d），E（0）が無限大にならないことを考慮すれば，これらが零となることはない。そこで（付3－26），（付3－27）式よりaを求めるための関係式を導く。（1）項と同様に，$y = -gV_B / kT$とおけば，（付3－27）式から

$$\exp\left(\frac{y}{2}\right) = \frac{\sinh(ad-b)}{\sinh(-b)}$$ ……（付3－28）

（付3－26），（付3－28）式から

$$\frac{gQ_t d}{2\varepsilon kT}\sinh ad$$

$$= ad\left\{\exp\left(-\frac{y}{2}\right) + \exp\left(\frac{y}{2}\right) - 2\cosh ad\right\}$$

……（付3－29）

よって，$P = gQ_t d / 4\varepsilon kT$とおけば

$$P\frac{\sinh ad}{ad} + \cosh ad = \cosh\left(\frac{y}{2}\right)$$

……（付3－30）

さらに（付3－28）式から

$$\coth b = \frac{\cosh ad - \exp(y/2)}{\sinh ad}$$

・・・・・・(付3－31)

よって，

$$\left.\begin{aligned} b &= \operatorname{arccoth} s \\ &= \frac{1}{2}\ln\frac{s+1}{s-1} \\ s &= \frac{\cosh ad - \exp(y/2)}{\sinh ad} \end{aligned}\right\} \cdots\cdots(付3-32)$$

従って(付3－30)，(付3－32)式で定められるa，bを用いれば，(付3－25)式より電界E(x)が求められる。

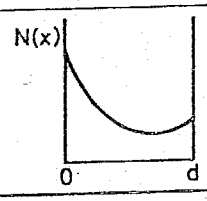
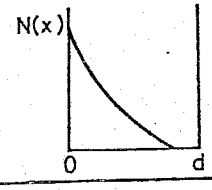
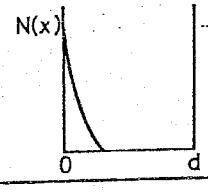
＜3・2＞ 電位と電荷密度

電荷密度ρ(x)および電位V(x)は，(付3－3)式で与えられるポアソンの式を解くことで得られる。すなわち，下式(付3－33)式中のE(x)に上記で求めたE(x)を代入し計算すればよい。

$$\left.\begin{aligned} V(x) &= -\int_0^x E(x)\,dx + V_B \\ \rho(x) &= qN(x) = \varepsilon\frac{dE(x)}{dx} \end{aligned}\right\} \cdots\cdots(付3-33)$$

ここで，N(x)はイオン濃度を表わす。付3－1表には，これらの結果を整理して示した。

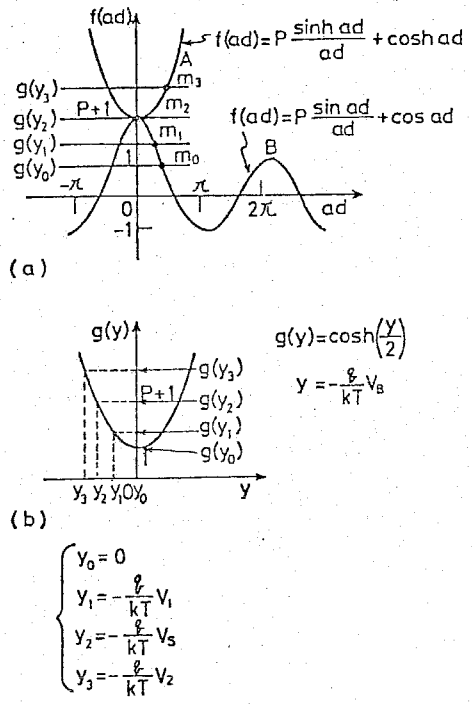
付3－1表 イオン空間電荷の諸量の計算式

	$\lvert V_B\rvert<\lvert V_S\rvert$ $(C_1>0)$	$\lvert V_B\rvert=\lvert V_S\rvert$ $(C_1=0)$	$\lvert V_B\rvert>\lvert V_S\rvert$ $(C_1<0)$	備考
N(x)	$\frac{2\varepsilon kT}{q^2}\frac{a^2}{\cos^2(ax+b)}$	$\frac{2\varepsilon kT}{q^2}\frac{1}{(C_2-x)^2}$	$\frac{2\varepsilon kT}{q^2}\frac{a^2}{\sinh^2(ax-b)}$	$P=\frac{qQ_t}{4\varepsilon kT}d$
E(x)	$\frac{2akT}{q}\tan(ax+b)$	$\frac{2kT}{q}\frac{1}{C_2-x}$	$-\frac{2akT}{q}\coth(ax-b)$	$y=-\frac{q}{kT}V_B$
V(x)	$\frac{2kT}{q}\ln\frac{\cos(ax+b)}{\cos(ad+b)}$	$\frac{2kT}{q}\ln\frac{C_2-x}{C_2-d}$	$\frac{2kT}{q}\ln\frac{\sinh(ax-b)}{\sinh(ad-b)}$	$\lvert V_S\rvert=\frac{2kT}{q}\log(u+\sqrt{u^2-1})$
Q_tとV_Bの関係	$P\frac{\sin ad}{ad}+\cos ad=\cosh\left(\frac{y}{2}\right)$	$P+1=\cosh\left(\frac{y}{2}\right)$	$P\frac{\sinh ad}{ad}+\cosh ad=\cosh\left(\frac{y}{2}\right)$	$u=\frac{qdQ_t}{4\varepsilon kT}+1$
(未知数の計算)	$b=\tan^{-1}\left(\frac{\cos ad-\exp(y/2)}{\sin ad}\right)$	$C_2=\frac{d}{1-\exp\left(-\frac{q}{2kT}V_B\right)}$	$b=\frac{1}{2}\log\frac{x+1}{x-1}$，$x=\frac{\cosh ad-\exp(y/2)}{\sinh ad}$	
分布の概形				

<3-3> 電荷分布計算の手順

ここでは具体的に電荷量Q_tを含む試料の両電極間に電圧V_Bを印加した場合の計算手順を示す。<3・1>節で電界の計算を示したが，実際に電圧を印加した場合には(1)～(3)項のどの領域に属するかをまず決めなければならない。それには(付3-15)，(付3-23)，(付3-30)式の未定定数を決めるための関係式を考えればよい。

すなわち，付3-2図(a)に示す上下の二曲線は，それぞれ(1)，(3)項の(付3-15)，(付3-30)式の左辺をf(ad)として，adを変数として表わしたものである。これらは縦軸f(ad)に対称であり，ad=0で図のように接する性質を持っている。(付3-15)，(付3-30)式の右辺はいずれも同じ関数でg(y)=cosh(y/2)の形であり，これをyを変数として示したのが，付3-2図(b)である。このyは既に示したように，印加電圧をV_Bとして$y=-gV_B/kT$である。印加電圧V_Bが与えられた場合，yが定まり，これによってg(y)の値が決定し，このg(y)の値に等しいf(ad)の値を(a)図上で定めればadが決定され，dは膜厚であるからαが定まることになる。付3-2図には$V_B=0$，V_1，V_S，V_2の印加電圧により，$y=y_0$，y_1，y_2，y_3が定められたとき方程式(付3-15)，(付3-30)式を満たす点m_0，m_1，m_2，m_3が決定されることを示している。ここで$V_B=V_S$，つまり$y_2=-gV_S/kT$はad=0となる解の状態を示したもので，この条件は丁度(付3-23)式にあたり，$C_1=0$のときの方程式である。従って，与えられたQ_tを用いてV_Sが定められるので，このV



付3-2図 計算領域を決定する説明図

sより印加電圧V_Bが小さければ，$g(y_0)$，$g(y_1)$で示すように$g(y)$は$g(y_2)$よりも小さくなり，(付3－15)式の付3－2図(a)で示すBの曲線でadが定められ，このことは$C_1>0$の場合の計算手順に従わなければならないことを示している。逆にV_Sより大きなV_Bが印加されたときは，$g(y_3)$で示すように$g(y)$は大きくなり，(付3－30)式の付3－2図(a)の曲線Aでadが定められ，$C_1<0$の場合の計算によらなければならない。

以上の結果をもとにすれば，全イオン量Q_tと印加電圧V_Bが与えられたとき(1)～(3)項のいずれの計算によるべきかは直ちに判定することができる。すなわち，まず与えられたQ_tを用いて$C_1=0$の条件の場合の(付3－23)式を満たす電圧V_sを求めてみる。これは(付3－23)式をV_sについて解いた次の式を用いればよい。

$$\left.\begin{aligned} V_S &= -\frac{2kT}{g}\ln\left(u+\sqrt{u^2-1}\right) \\ \text{ただし，}\quad u &= \frac{gQ_t d}{4\varepsilon kT}+1 \end{aligned}\right\} \cdots\cdots(付3-34)$$

印加電圧V_Bと上に計算されたV_Sとの大小関係によって以下のように計算する。

(a) $|V_B|<|V_S|$のとき　$C_1>0$なる(1)項の計算

(b) $|V_B|=|V_S|$のとき　$C_1=0$なる(2)項の計算

(c) $|V_B|>|V_S|$のとき　$C_1<0$なる(3)項の計算

以上(a)～(c)項により未知定数が決められ電界が求められる。また電位$V(x)$，電荷密度$P(x)$，またはイオン濃度$N(x)$が(付3－33)式によって得られる。これらを計算する式は前述したように付3－1表に示してある。

付 録 4　　収束法による電荷分布の計算について

ホッピング数値計算法を用いて解析を行なう場合，初期分布を必要とすることがしばしば起こる。第3章では逐次計算による方法を述べたが，ここでは印加電圧 V_B，全電荷量 qN_t が既知であるとして，ニュートン法による収束解法について述べる。

＜4－17　ニュートン法

n元の連立非線形方程式は，一般に次式で書き表わせる。

$$f_j(x_1, x_2, \cdots, x_n) = 0$$
$$(j = 1, 2, \cdots, n) \qquad \cdots\cdots (付4-1)$$

(付4－1)式を解 $(x_1^\circ, x_2^\circ, \cdots, x_n^\circ)$ の近傍でTaylor展開すれば，

$$f_j(x_1^\circ + \delta x_1, x_2^\circ + \delta x_2, \cdots, x_n^\circ + \delta x_n)$$
$$= f_j^\circ(x_1^\circ, x_2^\circ, \cdots, x_n^\circ) + \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial f_j^\circ}{\partial x_i} \delta x_i = 0$$
$$(j = 1, 2, \cdots, n) \qquad \cdots\cdots (付4-2)$$

となる。このことは，$x_1^\circ + \delta x_1, x_2^\circ + \delta x_2, \cdots, x_n^\circ + \delta x_n$ が(付4－1)式の非常によい近似解であることを示している。その場合，(付4－2)式より

$$\mathbb{A} \cdot \mathbb{X} = \mathbb{F}$$

ただし，

$$\mathbb{A} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1^\circ}{\partial x_1}, \frac{\partial f_1^\circ}{\partial x_2}, \cdots, \frac{\partial f_1^\circ}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_2^\circ}{\partial x_1}, \frac{\partial f_2^\circ}{\partial x_2}, \cdots, \frac{\partial f_2^\circ}{\partial x_n} \\ \cdots\cdots \\ \frac{\partial f_n^\circ}{\partial x_1}, \frac{\partial f_n^\circ}{\partial x_2}, \cdots, \frac{\partial f_n^\circ}{\partial x_n} \end{bmatrix}, \quad \mathbb{X} = \begin{bmatrix} \delta x_1 \\ \delta x_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \delta x_n \end{bmatrix}, \quad \mathbb{F} = \begin{bmatrix} -f_1^\circ \\ -f_2^\circ \\ \cdot \\ \cdot \\ -f_n^\circ \end{bmatrix}$$

$\cdots\cdots (付4-3)$

なる連立方程式を導くことができるが，ニュートン法では以下のようにして上

式を用いて解を求める。

いま，εをあらかじめ与えた収束を判定するための小さな正数とする。初期値（x_{10}，x_{20}，・・・，x_{n0}）に対して係数A，Fを定め，（付4－3）式を解いて，δx_1，δx_2，・・・，δx_n を求めた場合，$|\delta x_i| < \varepsilon$（$i = 1, 2, \cdots, n$）がみたされるならば（$x_{10}$，$x_{20}$，・・・，$x_{n0}$）は解となる。そうでない場合は，初期値を（$x_{10}+\delta x_1$，$x_{20}+\delta x_2$，・・・，$x_{n0}+\delta x_n$）として同様の計算を繰り返し，上記$|\delta x_i| < \varepsilon$の条件が満足されるまで計算を続ける。

以上のようにすれば解を求められるが，（付4－3）式からも明らかなように，そのためにはn元の連立方程式の一階微分による係数Aを計算しておく必要がある。次項では，電荷分布計算におけるこの係数を求める。

<4－2）　電荷分布の計算

第3章で述べたように電荷分布計算のための基本式は次のようである。

$$\begin{cases} f_j = \dfrac{N_j}{N_t}\cdot\dfrac{N_{j+2}}{N_t} - \left(\dfrac{N_{j+1}}{N_t}\right)^2 \exp\left(\dfrac{\delta^2 l N_t}{\varepsilon kT}\cdot\dfrac{N_{j+1}}{N_t}\right) = 0 \\ \qquad (j = 1, 2, \cdots, n-2) \\ f_{n-1} = \dfrac{N_1}{N_t} - \dfrac{N_n}{N_t}\exp\left(\dfrac{\delta}{kT}V_B\right) = 0 \quad (j = n-1) \\ f_n = \sum_{i=1}^{n}\dfrac{N_i}{N_t} - 1 = 0 \quad (j = n) \end{cases} \quad \cdots\cdots (付4-4)$$

よって，$x_j = N_j / N_t$（$j = 1, 2, \cdots, n$）を未知数として，係数Aを定めるための一階微分式を計算すれば次のようになる。

（i）$j = 1, 2, \cdots, n-2$の場合

（a）$i \neq j, j+1, j+2$のとき

$$\frac{\partial f_j}{\partial x_i} = 0$$

（b）$i = j$のとき

$$\frac{\partial f_j}{\partial x_j} = x_{j+2}$$

(c) $i = j+1$ のとき

$$\frac{\partial f_j}{\partial x_i} = \left(-2x_{j+1} - \frac{g^2 l N_t}{\varepsilon kT} x_{j+1}^2\right) \exp\left(\frac{g^2 l N_t}{\varepsilon kT} x_{j+1}\right)$$

(d) $i = j+2$ のとき

$$\frac{\partial f_j}{\partial x_i} = x_j$$

(ii) $j = n-1$ の場合

$$\frac{\partial f_{n-1}}{\partial x_1} = 1$$

$$\frac{\partial f_{n-1}}{\partial x_i} = 0 \quad (i = 2, \cdots, n-1)$$

$$\frac{\partial f_{n-1}}{\partial x_n} = -\exp\left(\frac{g}{kT} V_B\right)$$

(iii) $j = n$ の場合

$$\frac{\partial f_n}{\partial x_i} = 1 \quad (i = 1, 2, \cdots, n)$$

付 録 5. 絶縁体中の電位，電界の計算とホッピング数値解析法における諸量の表示

絶縁体中の電荷分布ρ(x)が定まっているとき，ポアソンの式を解くことにより，電位φ(x)，電界E(x)などを求める。そして，これら諸量のホッピング数値解析法における表示式を導く。

<5・1> ポアソンの式の解法と連続量による諸量の表示

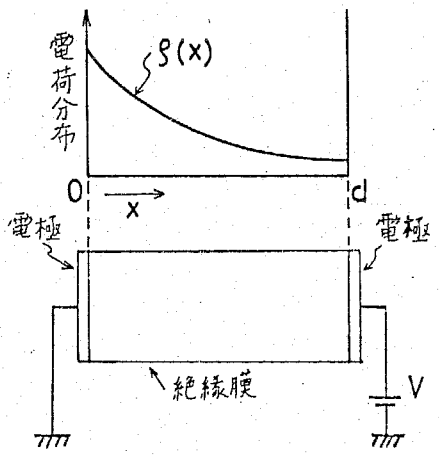
(5-1-1) 電位

付5．1図に示すように，絶縁膜厚dと電荷密度ρ(x)が与えられたとき，膜中の電位φ(x)はポアソンの式

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} = -\frac{\rho(x)}{\varepsilon} \quad \cdots\cdots (付5-1)$$

を与えられた境界条件で解くことで得られる。

いま，φ(0)=0，φ(d)=Vとすれば，(付5-1)式を積分して次のようになる。



付5．1図 絶縁膜の電荷分布

$$\phi(x) = -\frac{1}{\varepsilon}\int_0^x\int_0^x \rho(x)\,dx\,dx + C_1 x + C_2 \quad \cdots\cdots (付5-2)$$

ただし，C_1，C_2は積分定数で次のようである。

$$\left.\begin{aligned} C_1 &= \frac{V}{d} + \frac{1}{\varepsilon}\int_0^d \frac{x}{d}\rho(x)\,dx \\ C_2 &= 0 \end{aligned}\right\} \quad \cdots\cdots (付5-3)$$

(付5-2)式に(付5-3)式を代入して，

$$\phi(x) = -\int_0^x\int_0^x \frac{\rho(x)}{\varepsilon}dx\,dx + \frac{x}{d}\int_0^d\int_0^x \frac{\rho(x)}{\varepsilon}dx\,dx + \frac{V}{d}x$$

・・・・・（付5－4）

（付5－4）式を積分して整理すれば，

$$\phi(x) = -x\int_0^x \frac{\rho(x)}{\varepsilon}dx + \int_0^x \frac{x}{\varepsilon}\rho(x)\,dx + \frac{x}{d}\left(\int_x^d \frac{d}{\varepsilon}\rho(x)\,dx - \int_x^d x\frac{\rho(x)}{\varepsilon}dx\right) + \frac{V}{d}x$$

$$= \frac{x}{d\varepsilon}\int_x^d (d-x)\rho(x)\,dx + \frac{d-x}{d\varepsilon}\int_0^x x\,\rho(x)dx + \frac{V}{d}x$$

・・・・・（付5－5）

従って，（付5－5）式が膜中の電位φ（x）を定める式となる。

（5－1－2）　電界

電界E（x）は，（付5－5）式で示される電位φ（x）を微分することにより得られる。従って，

$$E(x) = -d\phi(x)/dx = \int_0^x \frac{\rho(x)}{\varepsilon}dx + \int_x^d \frac{x-d}{d\varepsilon}\rho(x)\,dx - \frac{V}{d}$$

・・・・・（付5－6）

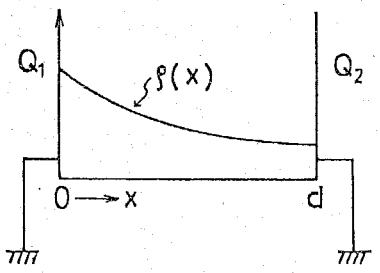
となる。よって電極面における電界E（0）及びE（d）は下式で与えられる。

$$E(0) = \frac{1}{\varepsilon}\int_0^d \frac{x-d}{d}\rho(x)\,dx - \frac{V}{d} \quad \cdots（付5－7）$$

$$E(d) = \frac{1}{\varepsilon}\int_0^d \frac{x}{d}\rho(x)\,dx - \frac{V}{d} \quad \cdots（付5－8）$$

（5－1－3）　空間電荷による電極面への誘起電荷量

空間電荷による電極面への誘起電荷量は，試料に印加される電圧が零の場合における電極面上の電荷量である。従って，（付5－7），（付5－8）式よりx＝0，x＝dにおける誘起電荷量Q_1，Q_2



付5.2図　試料内の電荷分布と誘起電荷

は，付5－2図のようにV＝0として次式で示される。

$$Q_1 = \varepsilon E(0) = -\int_0^d \frac{d-x}{d}\rho(x)\,dx \quad \cdots (付5-9)$$

$$Q_2 = -\varepsilon E(d) = -\int_0^d \frac{x}{d}\rho(x)\,dx \quad \cdots (付5-10)$$

（5－1－4）分極量と試料内における電荷分布の平均位置

空間電荷による分極量Pは，試料内における基準となる初期電荷分布を$\rho_0(x)$とした場合，そのモーメントのずれより評価され，次式で示される。

$$P = \int_0^d x\left(\rho(x) - \rho_0(x)\right)dx \quad \cdots\cdots (付5-11)$$

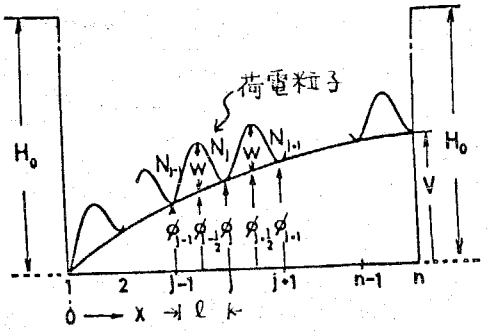
また，試料内における電荷分布の平均位置$\bar{x}$は，電荷分布の重心として示され，

$$\bar{x} = \int_0^d x\,\rho(x)\,dx \Big/ \int_0^d \rho(x)\,dx \quad \cdots (付5-12)$$

となる。

<5－2> ホッピング数値解析法における諸量の表示式

ホッピング法による数値解析を行なうには，このモデルでの（5－1－1）～（5－1－4）項の諸量の表示式を導く必要がある。ここでは，付5．3図に示すようにイオンに対するホッピングモデルで考えるが，この結果は電子伝導現象に対してもそのまま用いられる。



付5．3図 試料内の荷電粒子の位置及び電位

一次元イオンホッピングモデルでは，付5．3図に示すように，ホッピング距離ℓで隔てられた試料内のn個の各ポテンシャル井戸にN_j（$j=1,2,\cdots n$）個のイオンが存在するとしている。従って，電荷密度$\rho(x)$は，ポテンシャル井戸近辺の平均濃度$g N_j/\ell$によって表わされるから，

$$\rho(x) = \sum_{j=1}^{n} \frac{g N_j}{\ell}\,\delta(x-(j-1)\ell) \quad \cdots (付5-13)$$

により与えられる。ただし，δはデルタ関数である。

また，付5－3図より

$$d=(n-1)\ell \qquad \cdots\cdots(付5-14)$$

および，j番目の井戸の位置xは，

$$x=(j-1)\ell \qquad \cdots\cdots(付5-15)$$

となる。この(付5－13)～(付5－15)式で与えられる関係式を(5－1－1)～(5－1－4)で得られた諸式に代入すれば，ホッピング数値解析における表示式を求められる。例として，j番目の井戸の電位ϕ_jの計算を示す。(付5－13)～(付5－15)式を(付5－5)式に代入すれば，

$$\phi_j=\frac{d-(j-1)\ell}{d\varepsilon}\sum_{i=1}^{j-1}(i-1)\ell\frac{8N_i}{\ell}\ell$$

$$+\frac{(j-1)\ell}{d\varepsilon}\sum_{i=j}^{n}(d-(i-1)\ell)\frac{8N_i}{\ell}\ell+\frac{(j-1)\ell}{d}V$$

$$=\frac{8\ell^2}{d\varepsilon}\left\{(n-j)\sum_{i=1}^{j-1}(i-1)N_i+(j-1)\sum_{i=j}^{n}(n-i)N_i\right\}+\frac{(j-1)\ell}{d}V$$

$$\cdots\cdots(付5-16)$$

同様にして，電界などの諸量の表示式を導くことができる。その結果を付5－1表に整理して記した。ただし，E_jはj－1番目とj番目のポテンシャル井戸間の電界，E_0，E_nは電極界面の電界を表わしている。

付5－1 表　絶縁体中の連続量およびホッピング法による諸量の表示

諸　量	連　続　量　での表示	ホッピング法における表示
電荷密度	$\rho(x)$	$\rho_j = \delta N_j / \ell$
電　位	$\phi(x) = \frac{x}{d\varepsilon}\int_0^d (d-x)\rho(x)dx + \frac{d-x}{d\varepsilon}\int_x^d x\rho(x)dx + \frac{V}{d}$	$\phi_j = \frac{\delta\ell^2}{d\varepsilon}\left\{(n-j)\sum_{i=1}^{j-1}(i-1)N_i + (j-1)\sum_{i=j}^{n}(n-i)N_i\right\} + \frac{(j-1)\ell}{d}V$
電　界	$E(x) = \int_0^x \frac{\rho(x)}{\varepsilon}dx + \int_x^d \frac{x-d}{d\varepsilon}\rho(x)dx - \frac{V}{d}$	$E_j = \frac{\delta\ell}{d\varepsilon}\left\{\sum_{i=1}^{j}(i-1)N_i - \sum_{i=j+1}^{n}(n-i)N_i\right\} - \frac{V}{d}$
	$E(0) = \frac{1}{\varepsilon}\int_0^d \frac{x-d}{d}\rho(x)dx - \frac{V}{d}$	$E_0 = -\frac{\delta}{\varepsilon}\sum_{i=1}^{n}N_i + \frac{\delta\ell}{d\varepsilon}\sum_{i=1}^{n}(i-1)N_i - \frac{V}{d}$
	$E(d) = \frac{1}{\varepsilon}\int_0^d \frac{x}{d}\rho(x)dx - \frac{V}{d}$	$E_n = \frac{\delta\ell}{d\varepsilon}\sum_{i=1}^{n}(i-1)N_i - \frac{V}{d}$
誘起電荷量	$Q_1 = \varepsilon E(0)\Big\|_{V=0} = -\int_0^d \frac{d-x}{d}\rho(x)dx$	$Q_1 = \delta\sum_{i=1}^{n}N_i - \frac{\delta\ell}{d}\sum_{i=1}^{n}(i-1)N_i$
	$Q_2 = -\varepsilon E(d)\Big\|_{V=0} = -\int_0^d \frac{x}{d}\rho(x)dx$	$Q_2 = -\frac{\delta\ell}{d}\sum_{i=1}^{n}(i-1)N_i$
分極量	$P = \int_0^d x\{\rho(x) - \rho_0(x)\}dx$	$P = \delta\ell\sum_{i=1}^{n}\{(i-1)(N_i - N_i^0)\}$
電荷分布の平均位置	$\bar{x} = \int_0^d x\rho(x)dx \Big/ \int_0^d \rho(x)dx$	$\bar{x} = \frac{\ell}{d}\frac{\sum_{i=1}^{n}(i-1)N_i}{\sum_{i=1}^{n}N_i}$

付 録 6　ケーブル絶縁体中の電位，電界の計算とホッピング数値計算における諸量の表示

ケーブル絶縁体中の電荷分布 $\rho(r)$ が定まっているとき，ポアソンの式を解くことで，絶縁体中の電位 $\phi(r)$，電界 $E(r)$ などを求める。そして，ホッピング数値計算法における表示式を導く。ただし，扱う試料の形状及び境界条件は付6－1図の通りである。

<付6・1> ポアソンの式の解法と連続量による諸量の表示

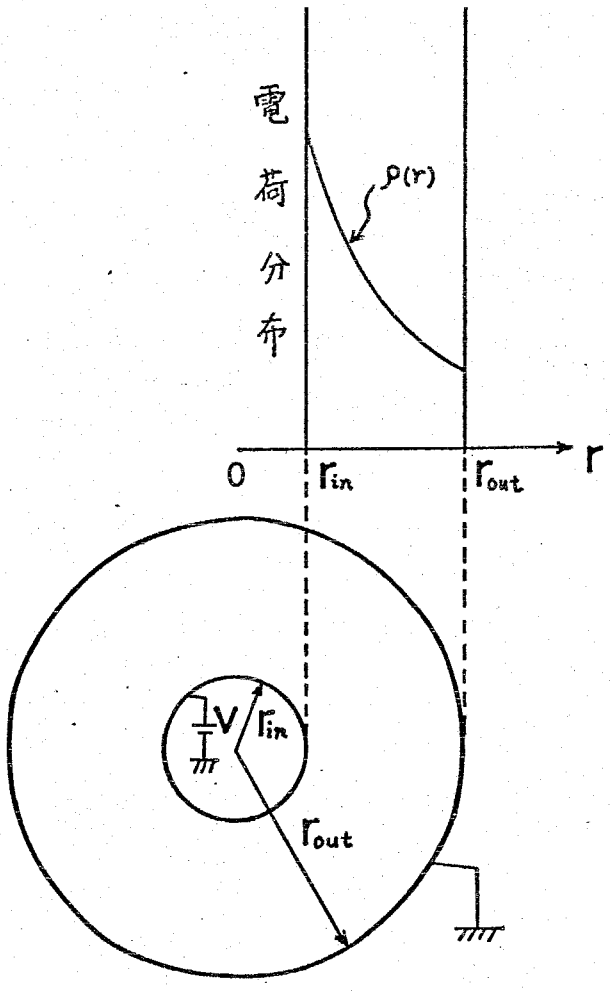
(6－1－1) 電 位

付6－1図に示すように，電荷密度 $\rho(r)$ が与えられたとき，絶縁体中の電位 $\phi(r)$ はポアソンの式

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial \Phi}{\partial r}\right) = -\frac{\rho}{\varepsilon} \quad \cdots\cdots (付6-1)$$

を与えられた境界条件で解くことで得られる。いま，$\phi(r_{in}) = V$，$\phi(r_{out}) = 0$ とすれば，(付6－1) 式を積分して次のようになる。

$$\phi(r) = -\frac{\ln r}{\varepsilon}\int_{r_{in}}^{r} \rho r\, dr + \frac{1}{\varepsilon}\int_{r_{in}}^{r} \rho r \ln r\, dr + C_1(\ln r - \ln r_{in}) + C_2 \quad \cdots\cdots (付6-2)$$



付6－1図　ケーブルの形状と絶縁体中の電荷分布

ただし，C_1，C_2は積分定数で，境界条件より次のようになる。

$$\left.\begin{aligned} C_1 &= \frac{1}{\varepsilon}\cdot\frac{\ln r_{out}\int_{r_{in}}^{r_{out}}\rho r\,dr-\int_{r_{in}}^{r_{out}}\rho r\ln r\,dr-V}{\ln r_{out}-\ln r_{in}} \\ C_2 &= V \end{aligned}\right\} \quad \cdots\cdots (付6-3)$$

(付6-2)式に(付6-3)式を代入して整理すれば，

$$\begin{aligned}\phi(r)=&\frac{\ln r_{out}/r}{\ln r_{out}/r_{in}}\int_{r_{in}}^{r}\frac{\rho r}{\varepsilon}(\ln r-\ln r_{in})\,dr\\&+\frac{\ln r/r_{in}}{\ln r_{out}/r_{in}}\int_{r}^{r_{out}}\frac{\rho r}{\varepsilon}(\ln r_{out}-\ln r)\,dr\\&+\frac{\ln r_{out}/r}{\ln r_{out}/r_{in}}V \qquad \cdots\cdots (付6-4)\end{aligned}$$

従って，(付6-4)式が絶縁体中の電位$\phi(r)$を定める式となる。

(6-1-2) 電界

電界$E(r)$は，(付6-4)式で示される電位$\phi(r)$をrで微分することにより得られる。従って，

$$\begin{aligned}E(r)&=-d\phi(r)/dr\\&=\frac{1}{r}\int_{r_{in}}^{r}\frac{\rho r}{\varepsilon}(\ln r-\ln r_{in})\,dr\\&\quad-\frac{1}{r}\int_{r}^{r_{out}}\frac{\rho r}{\varepsilon}(\ln r_{out}-\ln r)\,dr\\&\quad+\frac{1}{r}\frac{V}{\ln r_{out}/r_{in}} \qquad \cdots\cdots (付6-5)\end{aligned}$$

となる。よって，$r=r_{in}$，$r=r_{out}$における内径及び外径の電界$E(r_{in})$，$E(r_{out})$は下式で与えられる。

$$E(r_{in}) = -\frac{1}{r_{in}}\int_{r_{in}}^{r_{out}} \frac{\rho r}{\varepsilon}(\ln r_{out} - \ln r)\,dr + \frac{1}{r_{in}}\frac{V}{\ln r_{out}/r_{in}} \quad \cdots\cdots (付\ 6\text{-}6)$$

$$E(r_{out}) = \frac{1}{r_{out}}\int_{r_{in}}^{r_{out}} \frac{\rho r}{\varepsilon}(\ln r - \ln r_{in})\,dr + \frac{1}{r_{out}}\frac{V}{\ln r_{out}/r_{in}} \quad \cdots\cdots (付6-7)$$

(付6-6)式を使えば，(付6-5)式は次のようにも書ける。

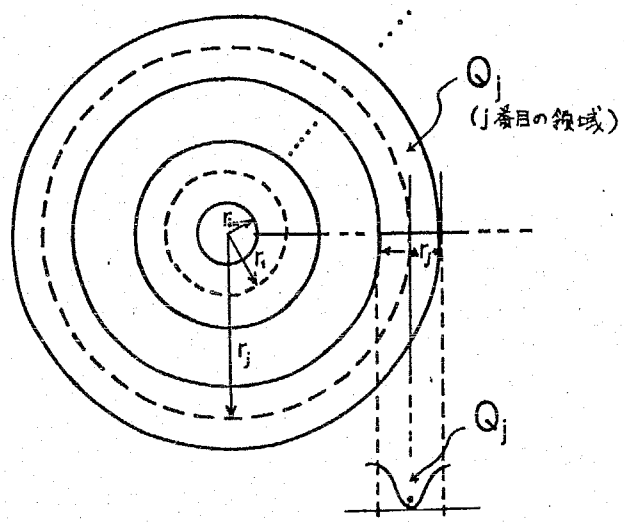
$$E(r) = \frac{1}{r}\int_{r_{in}}^{r} \frac{\rho r}{\varepsilon}\,dr + \frac{r_{in}}{r}E_{(r_{in})} \quad \cdots\cdots (付6-8)$$

< 6-2 > ホッピング数値計算法における諸量の表示式

ホッピング法による数値計算を行なうためには，前節の諸量に対するホッピング数値計算法における諸量の表示式を導く必要がある。その場合，ケーブル絶縁体においては付6-2図のように同心円状に領域を分けて考える。そのようにすれば一つの領域内の電荷量をQ_jとして，付6-2図より次の関係式が得られる。

$$Q_j = 2\pi \rho_j r_j \Delta r_j \quad \cdots (付6-8)$$

ただし，各領域における電荷密度は一定であるとする。そして，Q_jで示される各領域内の電荷量は$r = r_j$の位置に図示したようにすべてあるとして，ホッピング法における諸量の計算式を導く。結果は，付6-1表に整理しておいた。



付6-2図 ホッピング法による扱い

付6-1表 ケーブル絶縁体中の諸量の表示式

諸量	連続量での表示	ホッピング法における表示
電荷密度	$\rho(r)$	$\rho_j = \dfrac{Q_j}{2\pi r_j \Delta r_j}$
電位	$\phi(r) = \dfrac{\ln r_{out}/r}{\ln r_{out}/r_{in}} \displaystyle\int_{r_{in}}^{r} \frac{\rho r}{\varepsilon} \ln\frac{r}{r_{in}} dr + \frac{\ln r/r_{in}}{\ln r_{out}/r_{in}} \int_{r}^{r_{out}} \frac{\rho r}{\varepsilon} \ln\frac{r_{out}}{r} dr + \frac{\ln r_{out}/r}{\ln r_{out}/r_{in}} V$	$\phi_j = \dfrac{\ln r_{out}/r_j}{\ln r_{out}/r_{in}} \displaystyle\sum_{i=1}^{j} \frac{Q_i}{2\pi\varepsilon\Delta r_i} \ln\frac{r_i}{r_{in}} + \frac{\ln r_j/r_{in}}{\ln r_{out}/r_{in}} \sum_{i=j+1}^{n} \frac{Q_i}{2\pi\varepsilon\Delta r_i} \ln\frac{r_{out}}{r_i} + \frac{\ln r_{out}/r_i}{\ln r_{out}/r_{in}} V = -\sum_{i=1}^{j} E_i \Delta r_j + V$
電界	$E(r) = \dfrac{1}{r}\displaystyle\int_{r_{in}}^{r} \frac{\rho r}{\varepsilon} \ln\frac{r}{r_{in}} dr - \frac{1}{r}\int_{r}^{r_{out}} \frac{\rho r}{\varepsilon} \ln\frac{r_{out}}{r} dr + \frac{1}{r} \frac{V}{\ln r_{out}/r_{in}} = \frac{1}{r}\int_{r_{in}}^{r} \frac{\rho r}{\varepsilon} dr + \frac{r_{in}}{r} E(r_{in})$	$E_j = \dfrac{1}{r_j} \displaystyle\sum_{i=1}^{j} \frac{Q_i}{2\pi\varepsilon\Delta r_i} \ln\frac{r_i}{r_{in}} - \frac{1}{r_j} \sum_{i=j+1}^{n} \frac{Q_i}{2\pi\varepsilon\Delta r_i} \ln\frac{r_{out}}{r_i} + \frac{1}{r_j} \frac{V}{\ln r_{out}/r_{in}} = \frac{1}{r_j} \sum_{i=1}^{j} \frac{Q_i}{2\pi\varepsilon\Delta r_i} + \frac{r_{in}}{r_j} E(r_{in})$
	$E(r_{in}) = -\dfrac{1}{r_{in}}\displaystyle\int_{r_{in}}^{r_{out}} \frac{\rho r}{\varepsilon} \ln\frac{r_{out}}{r} dr + \frac{1}{r_{in}} \frac{V}{\ln r_{out}/r_{in}}$ $E(r_{out}) = \dfrac{1}{r_{out}}\displaystyle\int_{r_{in}}^{r_{out}} \frac{\rho r}{\varepsilon} \ln\frac{r}{r_{in}} dr + \frac{1}{r_{out}} \frac{V}{\ln r_{out}/r_{in}}$	$E(r_{in}) = -\dfrac{1}{r_{in}} \displaystyle\sum_{i=1}^{n} \frac{Q_i}{2\pi\varepsilon\Delta r_i} \ln\frac{r_{out}}{r_i} + \frac{1}{r_{in}} \frac{V}{\ln r_{out}/r_{in}}$ $E(r_{out}) = \dfrac{1}{r_{out}} \displaystyle\sum_{i=1}^{n} \frac{Q_i}{2\pi\varepsilon\Delta r_i} \ln\frac{r_i}{r_{in}} + \frac{1}{r_{out}} \frac{V}{\ln r_{out}/r_{in}}$

注) ホッピング法における表示の欄で $E(r_{in})$, $E(r_{out})$ はそれぞれ, E_0, E_1 となる。

付録 7　一般誘電体の定常分布の解析法について

一般誘電体の電荷分布を定める基本式は一般に次式で示される。

$$\mathbb{U} = \mathbb{W}(\mathbb{亜}) \cdot \mathbb{N} \qquad (付\ 7-1)$$

第12章で述べた様に亜はNの関数であるが，表面電荷法などによりこの関数系が定まる。以上のような非線型の連立方程式はニュートン法などにより解くことができる。ここでは，最も簡単な収束計算の一例を整理する。

(i)　$\mathbb{N} = \mathbb{N}_0$ を仮定する。

(ii)　Nに対する亜を算出する。(表面電荷法など)

(iii)　W(亜)を計算する。(遷移マトリクスの計算)

(iv)　$\bar{\mathbb{N}} = \mathbb{W}(\mathbb{亜})^{-1} \cdot \mathbb{U}$ の計算をする。すなわちW(亜)を定係数とみて(付7-1)式の連立方程式を解く。
ここでの計算は，有限要素法の解法の仕方などが参考となる。

(v)　$S = \bar{\mathbb{N}} / \mathbb{N} - 1$ を計算し，|S|が指定した値をPS以下であれば解として $\bar{\mathbb{N}}$ を採用する。そうでない場合は $\mathbb{N}_0 = \bar{\mathbb{N}}$ として(i)に戻り計算を続ける。

以上の手順で計算する場合，収束に時間がかかるので，元数の少ない場合は一次微分を考えたニュートン法の方がよい。(付録4参照)

付 録 8　　有限要素法によるPoisson方程式の解法について

有限要素法によりポアソンの式

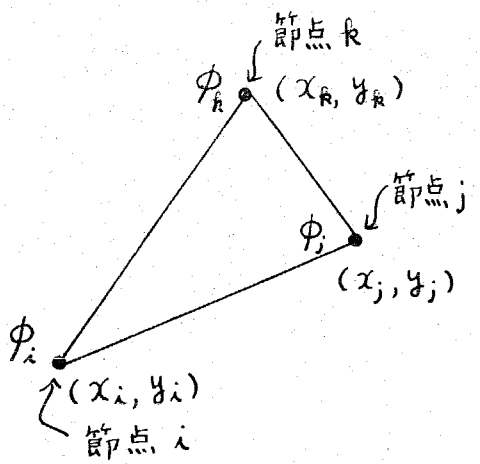
$$\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\phi}{\partial y^2}=-\frac{\rho}{\varepsilon} \qquad \cdots\cdots(付8-1)$$

を解くことは，（付8－1）式に対する汎関数

$$\alpha(\phi)=\iint_R\left\{\frac{1}{2}\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)^2+\frac{1}{2}\left(\frac{\partial\phi}{\partial y}\right)^2-\frac{\rho}{\varepsilon}\phi\right\}dxdy$$

$$\cdots\cdots(付8-2)$$

を最小とするような関数ϕを，領域Rの境界Γ上で，境界条件$\phi(x,y)=\phi_0$（ϕ_0は指定した値）を満たす関数の中から定めることである。その場合，領域を多角形の要素に分割した場合について述べる。



この領域内でのポテンシャルを，

$$\phi=\alpha_0+\alpha_1 x+\alpha_2 y \qquad \cdots\cdots(付8-3)$$

と仮定すれば，α_0，α_1，α_2の係数は，要素の三つの節点i，j，kにおけるφの値，ϕ_i，ϕ_j，ϕ_kより次のように定められる。

$$\begin{bmatrix}\alpha_0\\ \alpha_1\\ \alpha_2\end{bmatrix}=\frac{1}{\Delta}\begin{bmatrix}\Delta_i & \Delta_j & \Delta_k\\ y_j-y_k & y_k-y_i & y_i-y_j\\ x_k-x_j & x_i-x_k & x_j-x_i\end{bmatrix}\cdot\begin{bmatrix}\phi_i\\ \phi_j\\ \phi_k\end{bmatrix}=\frac{1}{\Delta}\cdot A\cdot 亜$$

ただし，

$$\Delta=x_j y_k+x_i y_i+x_k y_i-x_j y_i-x_k y_j-x_i y_k$$

$$\Delta_i=x_j y_k-y_j x_k,\quad \Delta_j=x_k y_i-y_k x_i,$$

$$\Delta_k=x_i y_j-x_j y_i$$

$$\cdots\cdots(付8-4)$$

また，（付8 －3）式をx，yについて偏微分すれば次の関係が得られる。

$$\alpha_1 = \frac{\partial \Phi}{\partial x} \quad , \quad \alpha_2 = \frac{\partial \Phi}{\partial y} \qquad \cdots\cdots（付8 －5）$$

そこで，（付8 －4），（付8 －5）式を（付8 －2）式に代入して，三角形要素に対する汎関数

$$\alpha(\Phi)_\Delta = \frac{1}{2}\iint_\Delta (\alpha_1^2 + \alpha_2^2)\,dx\,dy - \iint_\Delta \frac{\rho}{\varepsilon}\,dx\,dy$$

$$\cdots\cdots（付8 －6）$$

を求めてみる。まず第1項は，要素内で$\alpha_1^2 + \alpha_2^2$の値が一定であるとして，（付8 －4）式を代入して次のようになる。

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}\iint_\Delta (\alpha_1^2 + \alpha_2^2)\,dx\,dy &= \frac{|\Delta|}{2}(\alpha_1^2 + \alpha_2^2) \\ &= \frac{|\Delta|}{2}[\alpha_1, \alpha_2]\cdot\begin{bmatrix}\alpha_1 \\ \alpha_2\end{bmatrix} \\ &= \frac{|\Delta|}{2}(\mathbb{B}\,\mathbb{亜})^T\mathbb{正}(\mathbb{B}\,\mathbb{亜})\end{aligned}$$

ただし，$\mathbb{B}$，亜，正はそれぞれ次のような行列である。

$$\mathbb{B} = \begin{bmatrix} y_j - y_k, & y_k - y_i, & y_i - y_j \\ x_k - x_j, & x_i - x_k, & x_j - x_i \end{bmatrix}$$

$$\mathbb{亜}^T = [\Phi_i, \Phi_j, \Phi_k] \quad , \quad \mathbb{正} = \frac{1}{\Delta^2}\begin{bmatrix}1 & 0 \\ 0 & 1\end{bmatrix}$$

$$\cdots\cdots（付8 －7）$$

また，第2項は，（付8 －3），（付8 －4）式より

$$\iint_\Delta \frac{\rho}{\varepsilon}\Phi\,dx\,dy = \alpha_0\iint_\Delta \frac{\rho}{\varepsilon}\,dx\,dy + \alpha_1\iint_\Delta \frac{\rho}{\varepsilon}x\,dx\,dy$$

$$+\alpha_2 \iint_\Delta \frac{\rho}{\varepsilon} y \, dx\,dy$$

$$= [\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2] \cdot \mathbb{H}$$

$$= \frac{1}{\Delta} (\mathbb{A} \cdot \vec{\alpha})^T \cdot \mathbb{H}$$

・・・・・（付８　－８）

ただし，$\mathbb{H}$は次式で示される行列である。

$$\mathbb{H}^T = \left[\iint_\Delta \frac{\rho}{\varepsilon} dx\,dy, \iint_\Delta \frac{\rho}{\varepsilon} x\,dx\,dy, \iint_\Delta \frac{\rho}{\varepsilon} y\,dx\,dy \right]$$

以上，（付８　－７），（付８　－８）式を用いれば，汎関数$J(\Phi)_\Delta$を最小とするような関数ϕを要素内で求めることは，ϕ_i，ϕ_j，ϕ_kに対する（付８　－６）式の偏微分が零となることに対応する。この条件によって（付８　－６）式を整理すれば次の関係式が得られる。

$$\mathbb{K} \cdot \vec{\alpha} = \mathbb{F} \qquad \cdots\cdots（付８　－９）$$

ただし，

$$\mathbb{K} = \mathbb{B}^T \mathbb{D} \mathbb{B}, \quad \mathbb{D} = \frac{|\Delta|}{2\Delta^2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\mathbb{F} = \frac{|\Delta|}{2\Delta^2} \mathbb{A}^T \mathbb{H}$$

以上より，一つの要素に対する関係式（付８　－９）式が得られた。全体について求めるためには，（付８　－９）式の各要素についての関係式を重ね合わせて全体としての関係式を作り，境界条件を満足するような一連のϕの組を定めればよい。この手順をまとめると次のようになる。

（１）各要素に対する行列$\mathbb{K}$を重ね合わせて全体の行列$[\mathbb{K}]$を求める。そして，

$$[\mathbb{K}] \cdot [\vec{\alpha}] = [\mathbb{F}] \qquad \cdots\cdots（付８　－１０）$$

なる全体の関係式を作る。

（2）境界条件を代入する。すなわち，ポテンシャルϕ_iがϕ_i^0で与えられる場合には，[Ik]行列の(i，i)成分を1とし，残りのi行の成分は零とする。さらに，[F]行列のi成分をϕ_i^0で置き換える。このことは，（付8-10）式の関係式を次のように変形することを意味する。

$$[\tilde{K}]\cdot[\Phi]=[F] \quad \cdots\cdots（付8-11）$$

（3）（付8-11）式の連立方程式を解き，一連のϕ_iを求める。

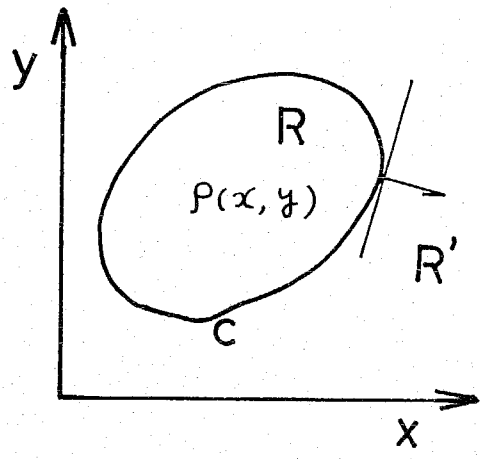
付 録 9　　ポテンシャルと電荷数の関係

グリーンの定理より，付9 －1図のようにRを境界Cで囲まれる領域，R'を外部の領域として，

$$\iint_R (\phi \nabla^2 G - G \nabla^2 \phi)\, dx'dy'$$

$$= \oint_c \left(\phi \frac{\partial G}{\partial n} - G \frac{\partial \phi}{\partial n}\right) dC$$

・・・・・（付9 －1）



付9 －1図　ポアソン場における グリーンの定理の説明図

ここで，ϕはρを電荷分布としてポアソンの式

$$\nabla^2 \phi = -\rho / \varepsilon$$

・・・・（付9 －2）

を満たし，nはCの法線方向ベクトルである。今，Gとしてグリーン関数

$$G(x-x', y-y')$$

$$= \frac{1}{2\pi\varepsilon} \ln \frac{k}{\sqrt{(x-x')^2 + (y-y')^2}} \quad \cdots (付9 -3)$$

を考えると，グリーン関数の性質より，

$$\nabla^2 G = -\delta(x-x', y-y')/\varepsilon \quad \cdots (付9 -4)$$

ただし，kは任意定数，δはデルタ関数である。

ここで領域内Rで，（付9 －2）～（付9 －4）式を（付9 －1）式に適用すれば，

$$\oint_c \left(\phi \frac{\partial G}{\partial n} - G \frac{\partial \phi}{\partial n}\right) dC$$

$$= \left\{ -\phi(x, y) + \iint_R G \rho \, dx'dy' \right.$$

$$\left| \quad \iint_R G\,\rho\,dx'dy' \right.$$

・・・・・(付9 -5)

ただし，(x, y)がR内のときは上式，R'内のときは下式である。

ここで，境界Cの曲線に対して，内部と外部に(付9 -5)式を二度用い，それぞれのポテンシャルをϕ_i，ϕ_eとして代入し，それらの結果について差をとれば，

$$\phi_c\left(\phi_i-\phi_e\right)\frac{\partial G}{\partial n}-\phi_c\left(\frac{\partial \phi_i}{\partial n}-\frac{\partial \phi_e}{\partial n}\right)dC$$

$$=-\phi+\iint G\,\rho\,dx'dy'$$

ただし，　$\phi=\phi_i$　(　(x, y)がR内のとき)

$\phi=\phi_e$　(　(x, y)がR'内のとき)

・・・・・・(付9 -6)

従って，$\phi_i=\phi_e$となるように境界上で考えれば，

$$\sigma=\frac{\partial \phi_i}{\partial n}-\frac{\partial \phi_e}{\partial n}$$

・・・・・(付9 -7)

として，(付9 -6)式より

$$\phi=\oint_C G\sigma\,dC+\iint_R G\cdot\rho\,dx'dy'$$

・・・・・(付9 -8)

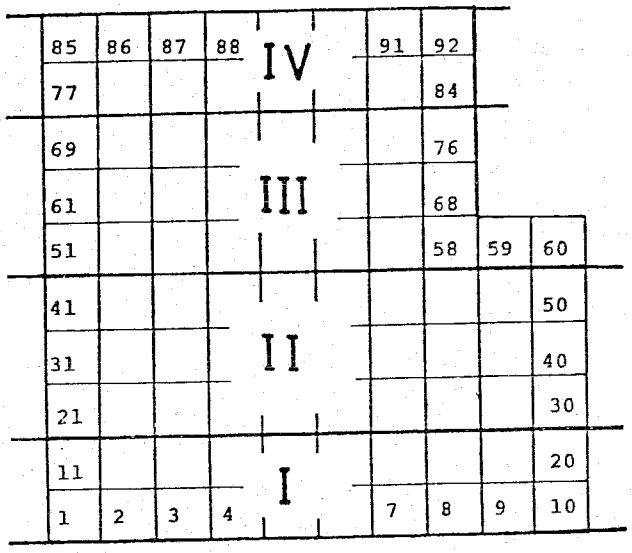
となる。(付9 -8)式で，σが境界面上における電荷すなわち表面電荷であることは(付9 -7)式より明らかである。

付 録 10　帯行列を係数に持つ連立方程式の解法について

遷移行列を$\mathbb{W}$で表わすと，電流の基本式は，

$$\mathbb{J} = \mathbb{W} \cdot \mathbb{N} \qquad \cdots\cdots\cdots (付10-1)$$

で示される。いま，この$\mathbb{W}$を第1ニ章でも述べたが，付10－1図のように4個のユニットに分割することで得られた行列とすれば，それは付10－2図で示すように帯行列となる。そして，以下に示す解法はこの例で述べるが，$\mathbb{W}$が帯行列であれば分割数が多い場合にも容易に拡張できるものである。



付１０－１図　ユニットによる分割

さて，実際に（付10－1）式を用いて電荷分布を計算する場合には境界条件を代入しなければならないが，その与え方により次の二通りに分けられる。

（i）電荷の流入および流出がなく，試料内の電荷量が一定である場合

（ii）試料内への電荷の注入がある場合

そこで，以下ではこの二通りについて分けて述べる。

（1）　（i）の場合

（付10－1）式は，電荷量一定の境界条件を代入すると（付10－2）式のように変形される。

A_{11}	A_{12}	0	0
A_{21}	A_{22}	A_{23}	0
0	A_{32}	A_{33}	A_{34}
0	0	A_{43}	A_{44}

付10－2図　付10－1図に対する遷移行列

これが解法すべき連立方程式で次のようである。

$$\tilde{W} \cdot N = B$$

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & 0 & 0 \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} & 0 \\ 0 & A_{32} & A_{33} & A_{34} \\ \tilde{A}_{41} & \tilde{A}_{42} & \tilde{A}_{43} & \tilde{A}_{44} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ B_4 \end{pmatrix} \quad \cdots (付1-2)$$

（付1-2）式中，（$\tilde{A}_{41}$, $\tilde{A}_{42}$, $\tilde{A}_{43}$, $\tilde{A}_{44}$）で記述された行列は，付1-2図中，（0, 0, A_{43}, A_{44}）の行列で，一番下位の行のみすべての要素を1とした行列である。また，B_4 は $B_4^T = (0, 0, \cdots, 0, g N_t)$ なる行列である。

（付1-2）式は，ガウスの消去法を用いて次のように，$\tilde{W}$, $\tilde{B}$ を既知として N について解くことができる。

（a） 第1段階

$$A_{11} x_1 + A_{12} x_2 = 0$$

であるから，

$$x_1 = -A_{11}^{-1} A_{12} x_2 = C_1 x_2 \quad \cdots (付1-3)$$

（b） 第2段階

$$A_{21} x_1 + A_{22} x_2 + A_{23} x_3 = 0$$

であるから，（付1-3）式を代入して x_2 について整理すれば，

$$x_2 = -(A_{21} C_1 + A_{22})^{-1} A_{23} x_3 = C_2 x_3 \quad \cdots (付1-4)$$

（c） 第3段階

$$A_{32} x_2 + A_{33} x_3 + A_{34} x_4 = 0$$

であるから，（付10－4）式を代入してx_3について整理すれば，

$$x_3 = -(A_{32}C_2 + A_{33})^{-1} A_{34} x_4 = C_3 x_4$$

……（付10－5）

（d） 第4段階

$$\tilde{A}_{41}x_1 + \tilde{A}_{42}x_2 + \tilde{A}_{43}x_3 + \tilde{A}_{44}x_4 = B_4$$

であるから，（付10－3），（付10－4），（付10－5）式を代入して整理すれば，

$$x_4 = (\tilde{A}_{41}C_1C_2C_3 + \tilde{A}_{42}C_2C_3 + \tilde{A}_{43}C_3 + \tilde{A}_{44})^{-1} B_4$$

……（付10－6）

以上（a）～（d）の各段階での計算より，（付10－6）式でx_4が定まるが，この結果を（付10－5）式，（付10－4）式と順次逆に代入してゆけば，x_3，x_2，x_1が求められることになる。これらを整理して，付10－3図に計算の流れを示す。

順序	計算の内容
1	$C_1 = -A_{11}^{-1} A_{12}$
2	$C_2 = -(A_{21}C_1 + A_{22})^{-1} A_{23}$
3	$C_3 = -(A_{32}C_2 + A_{33})^{-1} A_{34}$
4	$x_4 = (\tilde{A}_{41}C_1C_2C_3 + \tilde{A}_{42}C_2C_3 + \tilde{A}_{43}C_3 + \tilde{A}_{44})^{-1} B_4$
5	$x_3 = C_3 x_4$
6	$x_2 = C_2 x_3$
7	$x_1 = C_1 x_2$

4～7 の各段階で，x_4，x_3，x_2，x_1が順次定まる。

付10－3図　計算の流れ

（2）　（ii）の場合

電荷注入の条件を代入すると（付10－7）式のように変形される。

$$\mathbb{W} \cdot \mathbb{N} = \mathbb{B}$$

$$\begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & \mathbb{O} & \mathbb{O} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} & \mathbb{O} \\ \mathbb{O} & A_{32} & A_{33} & A_{34} \\ \mathbb{O} & \mathbb{O} & A_{43} & A_{44} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \mathbb{x}_1 \\ \mathbb{x}_2 \\ \mathbb{x}_3 \\ \mathbb{x}_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbb{B}_1 \\ \mathbb{B}_2 \\ \mathbb{B}_3 \\ \mathbb{B}_4 \end{bmatrix} \quad \cdots（付10－7）$$

（付10－7）式も（付10－2）式同様にガウスの消去法により解くことができ，その計算の流れは付10－4図のように整理される。

順序	計算の内容
1	$C_1 = A_{11}^{-1}\mathbb{B}_1$,　$D_1 = A_{11}^{-1}A_{12}$
2	$C_2 = (A_{22} - A_{21}D_1)^{-1}(\mathbb{B}_2 - A_{21}C_1)$, $D_2 = (A_{22} - A_{21}D_1)^{-1}A_{23}$
3	$C_3 = (A_{33} - A_{32}D_2)^{-1}(\mathbb{B}_3 - A_{32}C_2)$, $D_3 = (A_{33} - A_{32}D_2)^{-1}A_{34}$
4	$\mathbb{x}_4 = (A_{44} - A_{43}D_3)^{-1}(\mathbb{B}_4 - A_{43}C_3)$,
5	$\mathbb{x}_3 = C_3 - D_3\mathbb{x}_4$
6	$\mathbb{x}_2 = C_2 - D_2\mathbb{x}_3$
7	$\mathbb{x}_1 = C_1 - D_1\mathbb{x}_2$

4～7の各段階で，$\mathbb{x}_4$, $\mathbb{x}_3$, $\mathbb{x}_2$, $\mathbb{x}_1$ が順次定まる。

付10－4図　計算の流れ

参考文献

1) 犬石, 中島, 川辺, 家田「誘電体現象論」 電気学会（昭48）

2) 電気学会雑誌「最近の絶縁材料」95 （昭50）

3) 安藤, 遠藤, 沼尻, 日立評論 vol54, 899

4) 深川, 坂本, 他 電力中央研究所報告 177010

5) 今城, 坂本, 他 〃 177086

6) 小杉, 大畠, 他 古川電工時報 vol64, 1,（昭53）

7) P.Debye : Polar Molecules ; Reinhold publishing Corporation, New York(1929)

8) E.H.Snow et al. : J.Appl.Phys.36 , 1664 (1965)（たとえば,）

9) 日野 電気学会雑誌 95, 109（昭50）

10) A.Servini & A.K.Jonscher : Thin Solid Films 3, 341 (1969)

11) T.Hino : J.Appl.Phys. 46,1956 (1975)

12) 日野 電子通信学会CEM-75-19, 37(1975)

13) 岡, 中田 「固体誘電体論」 岩波書店（1960）

14) Y.Saito,M.Fukuzawa & H.Nakamura : IEEE Trans. 12, 31 (1977)

15) Y.Tarui,Y.Komiya & H.Teshima : Japan J. Appl. Phys. 6 191 (1967)

16) A.G.Tangena,J.Middelhoek & N.F.de Rooiij : J.Appl.Phys.49 , 2876 (1978)

17) M.A.Lampert & P.Merk : Current injection in Solids ; Academic Press (1970)

18) D.Kahn and J.Norman Maycock: J.Appl.Phys.46 , 4434(1967)

19) Donald R. Franceschetti and J.Ross Macdonald: J.Appl.Phys.50, 291(1979)

20) 武石, 原, 倉田 「バイポーラトランジスタの動作理論」 近代科学社

(1980)

21)G. D. スミス 「電算機による偏微分方程式の解法」サイエンス社(昭46)

22)N.F.Mott & R.W.Gurney :Electronic Processes in Ionic Crystals, Dover Publications,Inc. New York

23)F.Oosawa: Biopolymers, 9, 677 (1970)

24)A.Minakata,N.Imai & F.Oosawa: Biopolymers, 11,347(1972)

25)A.Warashina & A.Minakata : J.Chem.Phys. 58,4743(1973)

26)金子, 斉藤, 田中, 大日本電線時報 56, 25 (昭48) (たとえば,)

27)T. R. マッカーラ 数値計算法概論 サイエンス社

28)小宮, 垂井, 永井, 電気試験所彙報 30, 34 (昭41)

29)G.Jaffe & C.Z.Lemay: J.Chem.Phys. 21, 920 (1953)

30) 中島 電気試験所彙報 24, 801 (昭35)

31) 家田, 篠原, 電気学会論文誌79, 843 (昭34)

32) 金子, 日野, 電気学会論文誌A 98, 101 (昭53)

33)J.P.Stagg : Appl.Phys.Letters,31, 532 (1977)

34) 鐘ヶ江, 宮本, 電気学会論文誌A 95, 372 (昭50)

35)N.J.Chou: J.Electrochem.Soc:Solid State Science,118,601(1971)

36)M.Kuhn & D.J.Silversmith : J.Electrochem.Soc.:Solid State Science,118,966(1971)

37)H.M.Przewlocki and W.Marciniak:Phys.Stat.Sol.(a),29,265, (1975)

38) 金子, 山下, 日野 電気学会論文誌A 100, 197 (昭55)

39) 足立, 金子, 日野 電気学会全国大会 241 (昭55)

40)M.Zahn: IEEE Trans.Elect.Insulation,12,176(1977)

41)M.Zahn:IEEE Trans.on Elect.Insul.,EI-11,No.4,150(1976)

42)M.Zahn and H.Chatelon: J.Appl.Phys.48,1797(1977)

43) 日野, 山下 電気学会論文誌A 95, 79 (昭50)

44) 西谷, 吉野, 犬石　　電気学会論文誌A 95, 79 (昭50)

45) 金子, 日野　　電気学会論文誌A 97, 339 (昭52)

46) 日野, 金子　　電気学会論文誌A 96, 309 (昭51)

47) E.H.Martin & J.Hirsch : J.Appl.Phys.43,1001(1972)

48) H.J.Wintle : J.Appl.Phys. 41,4004(1970)

49) 松崎, 相原, 海老沼, 橋詰　　電気学会全国大会　1462 (昭54)

50) 中川, 小島　　大日本電線時報 56, 17 (昭48)

51) 細川, 松葉　　古川電工時報 64, 59 (昭和53)

52) A.Many & Rakavy: Phys.Rev.126,1980(1962)

53) A.Many,S.Z.Weisz and M.Simhony : Phys.Rev.126,1989(1962)

54) Peter Mark and Wolfgang Helfrich : J.Appl.Phys.33,205(1962)

55) M.Ieda,G.Sawa and U.Shinohara : Japan J.Appl.Phys.6,793(1967)

56) H.J.Wintle : Japan J.Appl.Phys.10,659(1970)

57) 安達, 紫田　　電気学会絶縁材料研究会資料

58) H.J.Wintle : J.Appl.Phys.43,2927(1972)

59) G.Dreyfus and J.Lewiner : Phys.Rev.B 8,3032(1973)

60) I.P.Batra,K.Keiji Kanazawa,and H.Seki : J.Appl.Phys.41,3416, (1970)

61) Martin M.Perlman and Jean-Louis Meunier : J.Appl.Phys.36, 420(1965)

62) EA Baum.TJ Lewis and R Toomer : J.Phys.D:Appl.Phys.10, 487(1977)

63) DM Taylor : J.Phys.D:Appl.phys.9,2269(1976)

64) B.J.Kriegler and R.Bartnikas : IEEE Trans. on Electron devices 1010(1970)

65) E.H.Snow and P.Gibbs : J.Appl.Phys.35,2368(1964)

66) S.Uemura: J.Poly.Science 12,1177(1974)

67) S.Osaki,S.Uemura and Y.Ishida : J.Poly.Science Part A-2 9, 585(1971)

68) B.J.Kriegler and R.Bartnikas : IEEE Trans. on Electron Devices ED-20, 722(1973)

69) S.Uemura : J.Poly.Science 10,2155(1972)

70) H.Shimokawa, A.Ohashi and M.Ueda : J.Phys.D : Appl.Phys.13; 107(1980)

71) C.G.Garton : J.Inst.Electr.Engr,88(II) 103(1941)

72) V.Wolfgang Held und K.Wenzel : ETZ-A, 121 (1960)

73) Von Fritz Liebscher : ETZ,423 (1943)

74) F.Stern and C.Weaver : J.Phys.C:Solid St.Phys.3 1736(1970)

75) フレーリッヒ 「誘電体論」 吉岡書店

76) K.Shibayama,H.Koezuka,H.Kanegae & H.Ono : Charge Storage, Charge Transport and Electrostatistics with their Applications 282 (1979)

77) T.J.Aprile & T.N.Trick : IEE Trans.on Circuits Theory CT-19, 354 (1972)

78) T.J.Aprile & T.N.Trick : Proceedings of the IEEE 60, 108 (1972)

79) D.G.Shaw : IEE Trans. on Electrical Insulation EI-10,62 (1975)

80) K.W.Plessner,R.Mcnicholl,and T.E.Shen : Proc.IEE 21,1599 (1974)

81) P.M.Sutton : J. American Chemical Society 47 ,219(1964)

82) H.Chang and G.Jaffe : J.Chem.Phys.20,1071 (1952)

83) G.Jaffe : Phys.Rev.85,354(1952)

84) 大久保, 里 電気学会雑誌 100, 609 (昭55)

85) A.Bradwell, R.Cooper and B.Varlow : Proc. IEE

86) 相原, 海老沼, 南 電気学会絶縁材料研究会 EIM 79-41
(たとえば)

87) 金子, 佐野 電気学会絶縁材料研究会 (昭53)
(たとえば)

88) M.P.Sarma et al. : IEEE Trans. Power Apparatus Syst. PAS-88, 718(1969)

89) 宅間 電力中央研究所報告 176057 (昭52)

90) プリッツ 「電界計算法」 朝倉書店 (昭49)

91) 戸川 「FORTRANによる有限要素法入門」 サイエンス社

92) R.F.Harrington, et al : Proc.Instn Elect.Engrs 116,10,1715 (1969)

93) R.F.Harrington : Proc.IEEE 55,136(1967)

94) H.Steinbigler : Electrotech. Z (ETZ-A), 90,663(1969)

95) H.Singer, et al : IEEE Trans. Power Apparatus Syst. PAS-93,5 (1974)

96) C.Bucci, R.Fieschi & G.Guidi : Phys.Rev.148,816(1966)

97) R.A.Creswell & M.M.Perlmann : J.Appl.Phys.41,2365(1970)

98) 山下, 日野 電気学会論文誌A 97, 53 (昭52)

99) T.W.Hickmott: J.Appl.phys.46, 2583(1975)

100) 山下, 金子, 日野 応用物理47, 1133 (1978)

101) J.P.Stagg : Appl.Phys.Lett.31,532(1977)

102) P.K.Nauta and M.W.Hillen : J.Appl.Phys.49,2862(1978)

103) S.M.Sze; Physics of Semiconductor Devices (1969) Wiley

104) S.R.Hofstein & F.P.Heiman : Proc. IEEE 51,1190(1963)

105) C.Jund : Solid State Elec.8,375 (1965)

106) E.J.Ryder : Phys.Rev.90, 766(1953)

107) R.Zuleeg : Solid state Elec.10, 559(1967)

108) S.R.Hofstein & G.Warfield: IEEE ED-12,129(1965)

109) 鳥谷部，山口，他　電子通信学会論文誌 J-62-C,826(1979)

110) C.G.B.Garrett and W.H.Brattain : Phys.Rev.99,376(1955)

111) R.H.Kingston et al. : J.Appl.phys.35,2458(1964)

112) A.Goetzberger : Bell Syst.Tech J. 45,1097(1966)

113) L.M.Terman :Solid State Electronics. 5,285(1962)

114) P.V.Gray and d.m.Brown : Appl.Phys.Lett.8,31(1966)

115) E.H.Nicollian and A.Goetzberger : Bell Syst.Tech.J.46,1055, (1967)

116) C.N.Berglund : IEEE Trans.Electron Devices ED-13,701(1966)

117) Y.W.Lam: J.Phys.D : Appl.Phys.4,1370(1971)

118) A.F.Saunders & G.T.Wright: Electronics Letters 6, 207(1970)

119) J.G.Simmons & G.W.Taylor: Solid State Electronics 17,125 (1974)

120) H.A.Mar & J.G.Simmons : Solid State Electronics 17,131(1974)

121) J.G.Simmons and H.A.Mar :Phys.Rev B 8,3865(1973)

122) J.G.Simmons and L.S.Wei : Solid State Electronics 17,117 (1974)

123) H.A.Mar and J.G.Simmons: Phys.Rev.B-11,775(1975)

124) J.S.Urawala,J.G.Simmons and H.A.Mar : Solid State Electronics 19,375(1976)

125) 勝部，原　第37回応物講演会 2a-V-10（昭51）

126) R.R.Haering and E.N.Adams : Phys.Rev.117,451(1960)

127) E.H.Nicollian and A.Goettzberger : IEEE Trans.Electron Devices ED-12,103(1965)

128) A.Goetzberger and E.H.Nicollian : J.Appl.Phys.38,4582(1967)

本研究に関する発表文献

I. 正論文

1. 山下, 岩本, 日野：「熱刺激表面電位によるＭＩＳ界面準位の測定法」電気学会論文誌Ａ－１００　９３（昭和５３年２月）
2. K.Yamashita,M.Iwamoto and T.Hino :"A method for studying interface states in MIS structures by thermally stimulated surface potential" J.Applied physics,vol 49,2866,May,1978
3. 岩本, 山下, 日野：「絶縁膜中のイオン空間電荷分布および分極の計算法」電気学会論文誌Ａ－１００　２５（昭和５５年１月）
4. 岩本, 日野：「ホッピングモデルによるイオン空間電荷分布並びに分極の計算法」電気学会論文誌Ａ－１００　２１３（昭和５５年４月）
5. 岩本, 日野：「ホッピングモデルによるイオン過渡電流の数値解析法とその物性定数測定への応用」電気学会論文誌Ａ－１００　２９１（昭和５５年５月）
6. 岩本, 日野：「絶縁体中の電子伝導の解析と数値解析に対するホッピングモデルの提案」電気学会論文誌Ａ－１００　２９９（昭和５５年５月）
7. 岩本, 日野：「ホッピングモデルによる拡散と電極界面電界を考慮したＳＣＬＣの数値解析およびその実例」電気学会論文誌Ａ－１００　３６１（昭和５５年６月）
8. 岩本, 日野：「ホッピング法を用いた空間電荷分極による誘電分散の数値解析」電気学会論文誌Ａ－１００　５３９（昭和５５年１０月）
9. 岩本, 日野：「実効移動度と電流注入特性を用いたホッピング法によるポリエチレンの空間電荷特性解析」電気学会論文誌Ａ－１００　６４１（昭和５５年１１月）

10. 岩本, 日野:「ホッピング法を用いたイオン空間電荷分極による大信号交流応答の数値解析」
電気学会論文誌掲載決定

11. 岩本, 日野:「ホッピング法による二次元ポアソン場の数値解析」
電気学会論文誌掲載決定

12. 日野, 岩本:「誘電体における空間電荷分極電流の取扱いと印加電圧極性反転電流」 電気学会論文誌投稿中

13. 岩本, 山下, 日野:「イオン空間電荷分極TSCの数値解析」
同 上

14. 岩本, 日野:「ホッピング法による過渡空間電荷制限電流の解析と数値計算」 同 上

15. 岩本, 日野:「ホッピング法によるポアソン場解析のための等価回路モデル」 同 上

16. T.Hino, M.Iwamoto and K.Yamashita: "A method of numerical analysis of the distribution of charge density and electrical field in ionic space charge polarization in dielectrics by Hopping Model" submitted to J.Applied Physics

17. T.Hino, M.Iwamoto and K.Yamashita: "Numerical analysis of ionic transient current by Hopping Model" submitted to J.Applied Physics

18. T.Hino, M.Iwamoto and K.Yamashita: "Numerical analysis of electronic steady state conduction in insulators by Hopping Model" submitted to J.Applied Physics

19. T.Hino, M.Iwamoto and K.Yamashita: "A numerical analysis of space charge limited current by Hopping Model under consideration of diffusion and the electrical field at the injection electrode" submitted to J.Applied Physics

20. K.Yamashita, M.Iwamoto and T.Hino: "Thermally stimulated current properties of mobile ion in SiO_2 film of MOS structure and its numerical analysis" submitted to Jpn.J.Applied Physics

Ⅱ. 研究会

1. 岩本, 金子, 山下, 日野:「ホッピングモデルによる空間電荷分極TSCの数値解析」 電気学会絶縁材料研究会EIM-80-61(1980)

Ⅲ. 学会発表

1. 岩本, 山下, 日野:「熱刺激表面電位によるMIS界面準位の測定法」昭和52年度電気学会全国大会 462 584(昭和52年)
2. 日野, 山下, 岩本:「ホッピングモデルによるイオン電導現象の解析Ⅰ」昭和54年度電気学会東京支部大会 46 62(昭和54年)
3. 山下, 岩本, 日野:「ホッピングモデルによるイオン電導現象の解析Ⅱ」昭和54年度電気学会東京支部大会 47 64(昭和54年)
4. 岩本, 日野:「ホッピングモデルを用いた空間電荷制限電流の解析」昭和54年度電気学会東京支部大会 48 66(昭和54年)
5. 山田, 岩本, 山下, 日野:「ホッピングモデルを用いたイオン空間電荷分極によるTSCの解析」昭和55年電気学会全国大会 206 248
6. 岩本, 日野:「ホッピングモデルによる注入電極界面電界を考慮したポリエチレンの空間電荷特性解析」 同上 226 268
7. 日野, 岩本:「実効移動度と電流注入特性を用いたホッピングモデルによるポリエチレンの空間電荷特性解析」 同上 225 267
8. 鈴木, 岩本, 金子, 山下, 日野:「絶縁体における表面電荷減衰の数値解析」 昭和55年電気学会全国大会 237 280(昭和55年)
9. 山下, 岩本, 日野:「MOS構造Si_3O_2膜中Na^+イオンの挙動とその数値解析」 第41回応用物理学会学術講演会 533(1980)