

2階の導関数に対する差分表現法の一提案

佐藤修平[†] 藤野清次^{††} 寺内衛^{††}

概要: 本論文では, Poisson 方程式に現れる 2階の導関数の近似に関する差分法の提案と検証を行う。差分法による離散化において, 格子間隔が不等間隔になると, 従来の近似の方法では精度が 1次精度に落ちてしまう。そこで, 本研究では, 2階の導関数を (i) 離散点同士の関係式, と (ii) 1階の導関数を含む式, に“分離”して考える。そして, 後者に対する近似精度を保持する方法として, 初期値問題によく用いられる Runge-Kutta 法を援用する。このようにして得られた新しい差分表現法の有効性を検証する。

Proposal of a Variant of Difference Scheme for Second-Order Derivative

Shuhei SATOH[†], Seiji FUJINO^{††} and Mamoru TERAUCHI^{††}

Abstract: In this paper, a variant of difference scheme for second-order derivative using Runge-Kutta method will be proposed. This variant has following properties:

1. In case of non-equidistant gridpoints, the accuracy of difference scheme is $O(h^2)$ as well as equidistant gridpoints.
2. Both value and first-order derivative of each gridpoint are decided simultaneously. In particular, the latter is decided without reduction of accuracy.
3. The derivatives only, however, on the boundaries must be given in advance.

This difference scheme will be derived from theoretical consideration and its effectiveness will be verified through numerical applications.

1 はじめに

1.1 研究背景

今日, 半導体デバイスの設計において, プロセス・デバイスシミュレータは必要不可欠の設計ツールである。そして今後もいままでも以上に応答速度や解析精度の向上を図る必要性が増すであろう。デバイスシミュレータなどをうまく有効に活用するには, ことで使われている計算の仕組みを知ることが重要であると思われる。そこで, 今回デバイスシミュレーション (以下, DS と略す) の基本方程式の一つである Poisson 方程式の 1 次元の差分解法を取り上げ, その精度の向上を図るべく研究を進めた。その結果, 次のことがわかった。

1. 等間隔差分法で精度を上げるためには計算時間がかかりすぎる。

2. 一方, 不等間隔差分法は局所性は優れているが一般に精度が等間隔のそれよりも低い。

そこで, 不等間隔格子を使っても等間隔格子と同等の精度が確保できないか, と考えた。その結果, 2階の導関数に対する新しい差分表現法を導出したので, それを提案し, 有効性を検証する。

1.2 デバイスシミュレーションの概要

DS では一般に静電電位 ψ , 電子濃度 n , 正孔濃度 p なる物理量を求める。そしてそれに必要な基本方程式は, 静電電位 ψ の (1)Poisson 方程式, (2) 電子電流連続方程式, (4) 正孔電流連続方程式, (3) 電子電流式, (5) 正孔電流式の五つの方程式で表される。すなわち, デバイス内の電位分布は Poisson 方程式で記述され, 電子電流連続方程式と正孔電流連続方程式は, 各々電子電流と正孔電流の保存式を表す。また, 静電電位 ψ は, その微分と誘電率 ϵ との積が電界強度 E を表す量である。

$$E = -\epsilon \nabla \psi$$

[†]広島市立大学大学院 情報科学研究科
Graduate School of Information Sciences,
Hiroshima City University
^{††}広島市立大学 情報科学部
Faculty of Information Sciences, Hiroshima City
University

定常状態での基本方程式は次のように表される [1]. 基本方程式の記述で用いた記号を表 1 にまとめた.

表 1: 基本方程式の記述で用いた記号とその内容

記号	内容	記号	内容
ϵ	誘電率	R	電子・正孔濃度 [†]
Ψ	静電電位	J_n	電子電流密度
q	単位電荷	J_p	正孔電流密度
n	電子濃度	μ_n	電子の移動度
p	正孔濃度	μ_p	正孔の移動度
N_D	ドナー濃度	D_n	電子の拡散係数
N_A	アクセプタ濃度	D_p	正孔の拡散係数
E	電界強度		

[†] 単位時間当たりに生成・消滅する電子・正孔濃度

● 静電電位 Ψ の Poisson 方程式

$$\nabla(\epsilon \nabla \Psi) = q(n - p - N_D + N_A) \quad (1)$$

● 電子電流連続方程式

$$-\nabla J_n + qR = 0 \quad (2)$$

● 電子電流式

$$J_n = -q(\mu_n n \nabla \Psi - D_n \nabla n) \quad (3)$$

● 正孔電流連続方程式

$$-\nabla J_p - qR = 0 \quad (4)$$

● 正孔電流式

$$J_p = -q(\mu_p p \nabla \Psi + D_p \nabla p) \quad (5)$$

式 (1)~式 (5) の互いに連成した五つの基本方程式を, 与えられた境界条件の下で解けば, デバイスの電気特性が求められる. これが, DS の計算法の概要である. 本研究では Poisson 方程式の 2 階の導関数に対する差分式の精度向上を目的とする.

2 差分法による離散化

2.1 等間隔格子の場合

十分に滑らかな関数 $u = u(x)$ を考える. このとき, 点 x から微小距離 Δx だけ離れた点の値 $u(x + \Delta x)$ は次の Taylor 展開式で表すことができる.

$$u(x + \Delta x) = u(x) + \Delta x u'(x) + \frac{(\Delta x)^2}{2} u''(x) + \dots \quad (6)$$

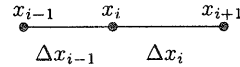
いま, 格子間隔 ($= h$) は等間隔とする. このとき, よく知られているように, 1 階の導関数に対する, 前進型差分式, 後退型差分式, そして中心差分式は各々表 2 のように表すことができる. また, 表 2 には 2 階の導関数に対する中心差分式および各差分式の近似精度も示す. なお, 離散点 x_i での関数値 $u(x_i)$ は u_i と略記する. 他の点での表記や導関数の表記も同様である.

表 2: 導関数に対する差分式とその精度 (h : 等間隔幅)

		差分式		
u'_i	前進型	後退型	中心差分	
	$\frac{u_{i+1} - u_i}{h}$	$\frac{u_i - u_{i-1}}{h}$	$\frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2h}$	
	1 次精度	1 次精度	2 次精度	
u''_i	中心差分 (2 次精度)			
	$\frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{h^2}$			

2.2 不等間隔格子の場合

3 点 x_{i-1}, x_i, x_{i+1} とその間隔 $\Delta x_{i-1}, \Delta x_i$ との関係を下に示す.



このとき, 3 点 x_{i-1}, x_i, x_{i+1} を使って点 x_i における 2 階の導関数 $d^2u(x_i)/dx^2 = u''_i$ に対する差分式を以下のように表すことができる [2].

$$u''_i = \frac{\Delta x_{i-1} u_{i+1} - (\Delta x_{i-1} + \Delta x_i) u_i + \Delta x_i u_{i-1}}{\left(\frac{\Delta x_{i-1} + \Delta x_i}{2}\right) \Delta x_{i-1} \Delta x_i} \quad (7)$$

以下, この差分式を“中心方式”と呼ぶ.

一方, 別の形の差分式も導くことができる. すなわち, d^2u/dx^2 に対しては du/dx の前進型差分式を使うが, du/dx の差分には後退型差分式を使う次の方法である.

$$u''_i = \frac{\Delta x_{i-1} u_{i+1} - (\Delta x_{i-1} + \Delta x_i) u_i + \Delta x_i u_{i-1}}{\Delta x_{i-1} \Delta x_i^2} \quad (8)$$

この差分式を“前進方式”と呼ぶ. さらに, d^2u/dx^2 に対する前進・後退型差分の適用順序を逆にすると以下の式が導ける. この差分式を“後退方式”と呼ぶ.

$$u''_i = \frac{\Delta x_{i-1} u_{i+1} - (\Delta x_{i-1} + \Delta x_i) u_i + \Delta x_i u_{i-1}}{\Delta x_{i-1}^2 \Delta x_i} \quad (9)$$

2.2.1 座標変換による差分式の導出

ここでは1次元の不等間隔格子を等間隔格子に変換する次のような座標変換を考える [2].

$$x = x(X)$$

すなわち, 元の方程式を X を独立変数とするように変数変換する. このとき, 2階の導関数 $d^2u(x_i)/dx^2 = u_i''$ に対する差分式を以下のように表すことができる.

$$u_i'' = \frac{\Delta x_{i-1}u_{i+1} - (\Delta x_{i-1} + \Delta x_i)u_i + \Delta x_i u_{i-1}}{\left(\frac{\Delta x_{i-1} + \Delta x_i}{2}\right)^3} \quad (10)$$

以下, この差分式を“変換方式”と呼ぶ.

3 提案する方法

3.1 2階の導関数に対する“分離”表現

(6)式から, 以下の二つの式が得られる.

$$\begin{aligned} u(x_{i+1}) &= u(x_i) + \Delta x_i u'(x_i) + \frac{(\Delta x_i)^2}{2} u''(x_i) \\ &\quad + \frac{(\Delta x_i)^3}{6} u'''(x_i) + O((\Delta x_i)^4), \\ u(x_{i-1}) &= u(x_i) - \Delta x_{i-1} u'(x_i) + \frac{(\Delta x_{i-1})^2}{2} u''(x_i) \\ &\quad - \frac{(\Delta x_{i-1})^3}{6} u'''(x_i) + O((\Delta x_{i-1})^4) \end{aligned}$$

次に, これらを $u''(x_i)$ について各々まとめる.

$$\begin{aligned} u''(x_i) &= \frac{2}{(\Delta x_i)^2} \{u(x_{i+1}) - u(x_i)\} - \frac{2}{\Delta x_i} u'(x_i) \\ &\quad - \frac{\Delta x_i}{3} u'''(x_i) + O((\Delta x_i)^2), \quad (11) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} u''(x_i) &= \frac{2}{(\Delta x_{i-1})^2} \{u(x_{i-1}) - u(x_i)\} + \frac{2}{\Delta x_{i-1}} u'(x_i) \\ &\quad + \frac{\Delta x_{i-1}}{3} u'''(x_i) + O((\Delta x_{i-1})^2) \quad (12) \end{aligned}$$

ここで, (11)式 $\times \Delta x_{i-1}$ + (12)式 $\times \Delta x_i$ をとると,

$$\begin{aligned} &(\Delta x_{i-1} + \Delta x_i)u''(x_i) \\ &= \frac{2\Delta x_{i-1}}{(\Delta x_i)^2} \{u(x_{i+1}) - u(x_i)\} \\ &\quad + \frac{2\Delta x_i}{(\Delta x_{i-1})^2} \{u(x_{i-1}) - u(x_i)\} \\ &\quad - 2\left\{\frac{\Delta x_{i-1}}{\Delta x_i} - \frac{\Delta x_i}{\Delta x_{i-1}}\right\} u'(x_i) \\ &\quad + O(\max\{\Delta x_i(\Delta x_{i-1})^2, \Delta x_{i-1}(\Delta x_i)^2\}) \end{aligned}$$

となる. 簡単化のため略号を使ってまとめると, 次のように関数値だけの前半の項と1階の導関数が抽出された後半の項の2つの項に“分離された”差分式が得られる.

$$\begin{aligned} u_i'' &\approx \frac{1}{\Delta x_{ave}} \{A u_{i+1} - (A+B)u_i + B u_{i-1}\} \\ &\quad - \frac{1}{\Delta x_{ave}} \left(\frac{1}{R} - R\right) u_i' \quad (13) \end{aligned}$$

ただし,

$$\Delta x_{ave} = \frac{\Delta x_{i-1} + \Delta x_i}{2}, \quad \text{格子幅比 } R = \frac{\Delta x_i}{\Delta x_{i-1}},$$

$$A = \frac{1}{\Delta x_i R}, \quad B = \frac{R}{\Delta x_{i-1}}.$$

次の節では, 後半の項の1階の導関数に対する近似法について考える.

3.2 1階の導関数に対するRK法の適用

まず, 不等間隔格子のときの u_i'' に対する差分式の精度について考える. 仮に, 1階の導関数 u_i' が正確に与えられれば, 式(13)の近似精度は2次である. しかし, u_i' を近似すると一般に精度が落ちる. 式(13)の後半の項 $u_i'/\Delta x_{ave}$ の精度と求める u_i'' の精度との関係は以下ようになる.

u_i'	$u_i'/\Delta x_{ave}$	u_i''
1次	0次	0次
2次	1次	1次
3次以上	2次以上	2次

1階の導関数 u_i' に対して精度が3次以上の近似式を用いれば, u_i'' の近似精度を2次に保つことが出来る. 次に, 1階の導関数の近似にRunge-Kutta法(以下, RK法と略す)を適用することを考える. 一般に,

$$u''(x) = f(x)$$

という偏微分(Poisson)方程式を考えるとき, これは1階の導関数 u_i' に関する初期値問題とも考えることができる. そこで, 初期値問題の近似解法に4次精度を持つRK法を用いる.

$$u_i' = u_{i-1}' + \frac{\Delta x_{i-1}}{6} \{\phi_1 + 2\phi_2 + 2\phi_3 + \phi_4\}, \quad (14)$$

$$\phi_1 = f(x_{i-1});$$

$$\phi_2 = \phi_3 = f\left(x_{i-1} + \frac{\Delta x_{i-1}}{2}\right);$$

$$\phi_4 = f(x_{i-1} + \Delta x_{i-1}) = f(x_i)$$

ただし, $x_0 < x_1 < \dots < x_m$ とし, 端点 x_0 での 1 階の導関数 u'_0 を RK 法の初期値とする.

以上の, 式 (13) と式 (14) を組み合わせて使う差分式を“分離方式”と呼ぶ. この方式には次の 3 つの大きな特徴がある.

1. 同時に関数値 u_i と 1 階の導関数 u'_i が求まる. すなわち, まず静電電位 ψ を式 (1) で求めた後数値微分で電界強度 E を求める必要がない. このため数値微分による精度低下がなくなる.
2. 代わりに, 境界上の 1 階の導関数の値 u'_0 が RK 法の初期値として必要になる.
3. 精度については, 関数値 u_i の精度が 2 次, 1 階の導関数 u'_i のそれが 4 次である.

各方式の u'_i , u_i 及び u''_i の近似精度を表 3 に示す [2].

表 3: 各計算方式の u'_i , u_i 及び u''_i の近似精度

方式	u'_i	u_i 及び u''_i
前進方式	1 次	0 次
後退方式	1 次	0 次
中心方式	2 次	1 次
分離方式	4 次	2 次

4 数値実験

数値実験を行った計算機の仕様を以下に示す.

CPU	Intel Celeron Processor 300A × 2
Clock	450 MHz
Memory	256 MB
OS	Microsoft Windows NT 4.0
Compiler	IBM C and C++ (V3.6.5)

計算はすべて倍精度演算で行った.

4.1 簡単なテスト問題での検証

まず, 前節で述べた分離方式の差分法の精度を以下の簡単なテスト問題で検証する.

$$u''(x) = e^x, \quad 0 \leq x \leq 1$$

解析解は $u(x) = e^x$ になる. また, 境界条件及び初期値を以下のように定める.

$$u(0) = u'(0) = e^0 = 1, \quad u(1) = e^1 = e$$

以下の 2 つの場合について数値実験をした.

(a) 格子幅比: R が一定 ($R=2$) の場合,

(b) 格子幅比: R が変化する場合.

要素数 m は 10 とする. (b) の例は格子幅の大きさが極端に違う格子を混ぜた例である. 実験で使用した格子点 x_i ($i = 0, \dots, 10$) の座標を表 4 に示す.

表 4: 2 つの場合の格子点の座標

格子点	(a) R は一定	(b) R は変化
x_0	0.0	0.0
x_1	9.8×10^{-4}	4.0×10^{-2}
x_2	2.9×10^{-3}	5.0×10^{-2}
x_3	6.8×10^{-3}	7.0×10^{-2}
x_4	1.5×10^{-2}	1.5×10^{-1}
x_5	3.0×10^{-2}	3.5×10^{-1}
x_6	6.2×10^{-2}	5.5×10^{-1}
x_7	1.2×10^{-1}	6.0×10^{-1}
x_8	2.5×10^{-1}	7.5×10^{-1}
x_9	5.0×10^{-1}	9.5×10^{-1}
x_{10}	1.0	1.0

関数 u の値を求めるに際し, 将来の並列化を想定して単純な Jacobi 反復法を使用する. 収束判定は,

$$\sum_{i=0}^m \frac{|u_i^{(k+1)} - u_i^{(k)}|}{|u_i^{(k+1)}|} \leq 10^{-10} \quad (15)$$

で行なう. ただし, 上付き添え字 (k) は反復回数を表す. 以下に計算結果を示す. (a), (b) の場合の各方式の誤差分布を図 1 と図 2 に各々示す. 図 1 から, 分離方式の差分法の精度が高いことがわかる. 図 2 から, 分離方式では大きな Δx が誤差に対して支配的になり, 誤差の伝播が起こることがわかる. したがって, 格子分割の仕方として, 他と比べて極端に大きな格子幅をもつ要素を使わないことが肝要である.

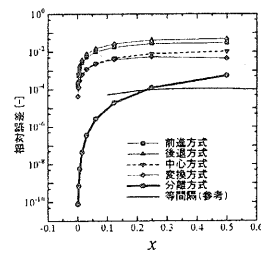


図 1: 格子幅比: R が一定の場合の各方式の誤差分布

4.2 半導体分野の応用問題への適用

DS の基本方程式である次の Poisson 方程式 (16) を, ここでは扱う.

$$\nabla(\epsilon \nabla u(x)) = q(n - p - N_D + N_A) \quad (16)$$

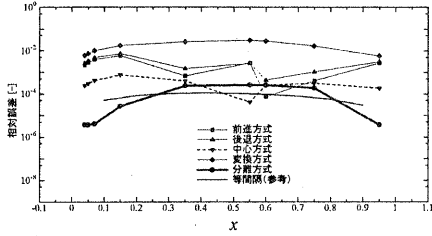


図 2: 格子幅比: R が変化する場合の各方式の誤差分布

式 (16) の単位電荷: q を除く 5 つのパラメータの値は物質固有であるから、まず計算する領域を決定する必要がある。ここでは、2 つの pn 接合が互いに対向するように形成された柱状シリコン半導体領域を考える (図 3)。図中の $0 \leq x \leq 0.9$ が解析領域であり、 y 方向は一樣とする。このとき、 pn 接合の境界から半導体中に空乏層が生成される [3]。階段状空乏層 (表 5) を考え、空乏層では電子・正孔ともに存在しないものとする。 n 型半導体内の空乏層の幅を w_n 、 p 型半導体内の空乏層の幅を w_p とする。また、 $x = 0, x = 0.9$ で接地する、すなわち、電位はそこで $0V$ という条件を設定する。領域内はすべてシリコン半導体であるから、誘電率 ϵ は x に依存せず一定となる。

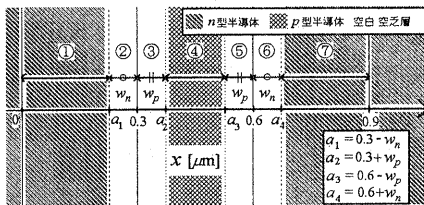


図 3: pn 接合における領域分割と空乏層の設定

表 5: 階段状空乏層の場合の空乏層幅 w_n, w_p とビルトイン電圧 V_{BI}^{given} (理論値) [3]

w_n [μm]	w_p [μm]	V_{BI}^{given} [V]
0.07315	0.07315	0.8134

図 3 中に ①~⑦の番号を付けた各領域の幅は以下のように与えられる。 $a_1 \sim a_4$ は空乏層幅 w_n, w_p を含んだ式で表される (図 3 中に表示)。

- ①: $\{x|0 \leq x \leq a_1\}$, ②: $\{x|a_1 < x \leq 0.3\}$,
- ③: $\{x|0.3 < x \leq a_2\}$, ④: $\{x|a_2 < x \leq a_3\}$,
- ⑤: $\{x|a_3 < x \leq 0.6\}$, ⑥: $\{x|0.6 < x \leq a_4\}$,
- ⑦: $\{x|a_4 < x \leq 0.9\}$.

ここで、解析領域内で一樣なパラメータを表 6 に、場所依存のパラメータを表 7 に各々示す。

表 6: 解析領域内で一樣な 2 つのパラメータの値

誘電率: ϵ [$A \cdot s / (V \cdot cm)$]	単位電荷: q [$A \cdot s$]
1.05365×10^{-12}	1.60218×10^{-19}

表 7: 場所依存のパラメータの値 [$1/cm^3$]

領域	N_D	N_A	n	p
①, ⑦	10^{17}	0	10^{17}	2×10^3
②, ⑥	10^{17}	0	0	0
③, ⑤	0	10^{17}	0	0
④	0	10^{17}	2×10^3	10^{17}

境界条件として、 $u_0 = u_m = 0$ を与える。また境界線 $x = 0, x = 0.9$ は同じ n 型半導体に挟まれており、かつ、空乏層に含まれてない。よって、境界において電界変化はないと考えられる。以上から、境界条件 $u'_0 = 0$ が与えられる。したがって、式 (16) に対して分離方式の差分法の適用が可能である。

反復解法には Jacobi 法を用いる。収束判定条件は前問のときと同じである。また、計算方法の妥当性を評価するために、今回は pn 接合におけるビルトイン電圧 V_{BI} を用いた。

数値実験の手順は以下のとおりである。

- [手順 1] 入力条件として V_{BI}^{given}, w_n, w_p を与える。
- [手順 2] 計算する領域を確定し、次に格子分割を行う。そして境界条件を定めて Poisson 方程式を Jacobi 法で反復計算して解く。
- [手順 3] 収束後、電位 $\psi = u(x)$ と電界 $E = -cu'(x)$ が求まる。
- [手順 4] 電位分布の差から V_{BI} を算出し、入力した V_{BI}^{given} と比較検討する。

表 8、図 4、5 に解析条件と計算結果を示す。これらの結果から次のことがわかる:

- 分離方式では、正確な空乏層幅が計算に反映できるので、高精度な V_{BI} が得られる。

さらに、要素数と Jacobi 法の収束との関係を表 9 と図 6 に示す。これらの結果から次のことがわかる。ただし、括弧内の数字は要素数 90 のときの結果を 1.0 としたときの比率を表す。

表 8: 各方式の要素数ごとの空乏層幅 w_n, w_p および求めたビルトイン電圧 V_{BI}

方式	要素数	w_n, w_p [μm]	V_{BI} [V]	相対誤差
等間隔	90	.07000*	.7451	8.4×10^{-2}
	180	.07000*	.7451	8.4×10^{-2}
	360	.07250*	.7993	1.8×10^{-2}
	900	.07310*	.8103	4.2×10^{-3}
分離	90	.07315	.8134	10^{-5} 以下
理論値	—	.07315	$V_{BI}^{given} = .8134$	—

* 等間隔方式では空乏層の境界が格子点上にない。そこで便宜的に等間隔方式の格子幅を使用して表現し得る、理論値を超えない最大の空乏層の幅を用いた。

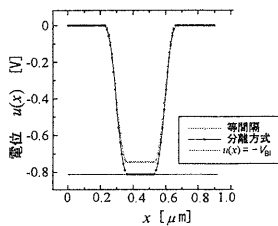


図 4: 方式による計算 (電位) 結果の違い (要素数:90)

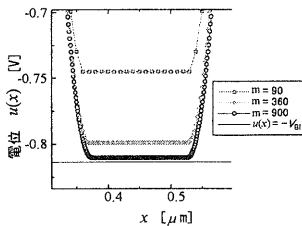


図 5: 等間隔方式で要素数を変化させたときの電位分布の推移 (図 4 の中央部分の拡大)

表 9: 要素数と Jacobi 法の収束との関係

方式	要素数	反復回数	時間 [sec]	時間/回数
分離	90	26328	1.29×10^0	4.90×10^{-5}
等間隔	90	26497 (≈ 1.0)	3.40×10^{-1} (≈ 1.0)	1.28×10^{-5}
	180	95703 (≈ 3.61)	2.90×10^0 (≈ 8.53)	3.03×10^{-5}
	360	344228 ($\approx 3.60^2$)	2.24×10^1 ($\approx 8.12^2$)	6.50×10^{-5}
	900	1843331	3.44×10^2	1.86×10^{-4}

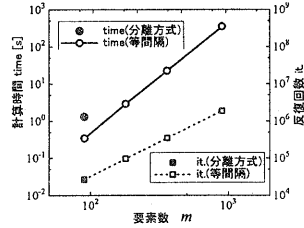


図 6: 2つの方式の要素数 vs. 計算時間と反復回数

- 表 8 で示した精度を考慮して、分離方式は同じ精度を得るのに計算時間が非常に少なくて済む。
- 分離方式の計算時間には、RK 法で 1 階の導関数を求める手間が含まれるが、その手間は小さい。
- 等間隔で要素数が m のとき、計算時間 $\propto m^{3.01}$ 、反復回数 $\propto m^{1.84}$ と見積りの目安も得られた。

5 まとめと今後の課題

DS の基本方程式の 1 つである pn 接合の Poisson 方程式の 2 階の導関数に対する新しい差分表現法を提案し有用性を検証した。その結果、

- 提案方法は、境界条件が厳密に与えられるという問題の特性を有効に利用した方法であること、
- 不等間隔の格子にも拘らず近似精度が高いこと、
- さらに、領域内部の関数の値が求まるのと同時に 1 階の導関数の値も精度よく求まること、

などがわかった。今後の課題として、(i) 2 次元への拡張の検討、(ii) 電流連続方程式も組み込んだデバイスシミュレータの開発、などが上げられる。

参考文献

- [1] 富士総合研究所編, "半導体素子設計シミュレータ", 丸善 (1991), pp.17-87.
- [2] 高見頼郎・河村哲也, "偏微分方程式の差分法", 東京大学出版会 (1994), p.16, pp.101-105.
- [3] 寺田和夫, "MOS デバイス設計の基礎", 大学教育出版 (1997).

付録

階段状空乏層近似の空乏層幅 w_n, w_p は以下のように示される。

$$w_n = \left\{ \frac{2\epsilon N_A V_{BI}^{given}}{q N_D (N_A + N_D)} \right\}^{1/2},$$

$$w_p = \left\{ \frac{2\epsilon N_D V_{BI}^{given}}{q N_A (N_A + N_D)} \right\}^{1/2}$$