



Title	半導体ナノシートにおける電子輸送理論に関する研究
Author(s)	岡田, 丈
Citation	大阪大学, 2025, 博士論文
Version Type	VoR
URL	<a href="https://doi.org/10.18910/101667">https://doi.org/10.18910/101667</a>
rights	
Note	

*The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA*

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

The University of Osaka

論文内容の要旨

氏 名 ( 岡 田 丈 )	
論文題名	半導体ナノシートにおける電子輸送理論に関する研究
<p>論文内容の要旨</p> <p>本論文は、半導体ナノシートにおける電子輸送理論に関する研究成果をまとめたもので、以下の6章で構成した。</p> <p>第1章では、研究背景および研究目的について述べた。まず、ナノシート構造が次世代トランジスタとして期待されている背景を説明した。そして、ナノシートの理論的な電子輸送解析の現状と課題について説明し、その背景を基に本研究の目的を述べた。さらに、本研究で開発した輸送理論や計算技術が従来の手法と比べて新しい点を明確にした。</p> <p>第2章では、本研究の基礎理論を説明した。はじめに、強結合近似モデルおよび有効質量近似を用いた電子状態の記述方法について述べた。そして、加速定理や群速度といった電子の動力学に関する概念を説明した。続いて、フェルミの黄金則に基づく散乱過程の記述方法を説明した。さらに、半古典的および量子論的な輸送モデルについて述べた。</p> <p>第3章では、本研究で開発した1次元等価モデル (1DEM) について述べた。1DEMは、輸送特性に関与するバンド構造の情報のみを含み、ハミルトニアン行列のサイズを小さく保つことで、量子輸送計算の効率を向上させることができることを示した。はじめに、開発した1DEMの表現行列を説明し、モデルパラメータの最適化には、多数のパラメータを効率的に最適化できる適応的モーメント推定を採用したことを述べた。そして、透過関数を1DEMに基づく非平衡グリーン関数法から求める方法を説明した。性能評価のため、さまざまな半導体1次元構造に1DEMを適用し、原子論モデル (AM) に基づく結果と比較した。AMのバンド構造のうち輸送特性に関与するバンドギャップ付近のものを1DEMが精度よく表現できることがわかった。また、透過関数を比較し、1DEMとAMが精度よく一致することがわかった。以上より、半導体1次元構造の量子輸送計算を、1DEMを用いることで、高精度かつ高効率に実行できることを実証した。</p> <p>第4章では、ラフネスを有する単一モードナノシートの量子輸送計算から平均自由行程を抽出するために、本研究で開発した統計的な手法を述べた。はじめに、開発した手法の詳しい原理および手続きを述べた。本開発手法は、チャネル長が短い領域でのみ用いることができた従来手法を拡張した手法であり、チャネル長によらず適用できることを示した。また、アンダーソン局在の影響を取り除くために非弾性散乱を追加で考慮する必要があるため、高速に計算できることを述べた。さらに、電極領域とチャネル領域とを明示的に分割する必要がある量子輸送計算から、電極領域に依存しないバルク的な物理量を計算できるという点にも独自性があることを示した。本開発手法を用いて平均自由行程のナノシート厚さ依存性を調べたところ、厚い領域ではよく知られた厚さの6乗に関する依存性を示し、薄い領域では依存性が弱くなることがわかった。この結果は、自己無撞着ボルン近似に基づく結果と整合していることを示した。</p> <p>第5章では、Krieger-Iafrate (KI) 方程式を用いて、1次元電子ガスにおける自由走行時のサブバンド間遷移確率を解析した結果を述べた。はじめに、逆有効質量テンソルの非対角成分が非ゼロの場合、量子閉じ込め効果によって輸送方向の有効質量が重くなることを示した。つぎにKI方程式に基づき、自由走行時のサブバンド指数変化を解析した。逆有効質量テンソルの非対角成分がゼロの場合、サブバンド指数は不変である一方、非対角成分が非ゼロの場合にはサブバンド指数が確率的に変化することがわかった。サブバンド間遷移が輸送特性に与える影響を定量的に解析するため、KI方程式から得たサブバンド間遷移確率を従来のモンテカルロシミュレーションに取り入れる新手法を説明した。新手法と従来手法を用いて移動度をシミュレーションし、新手法が従来手法では物理的に不十分であった点を改善できていることを示した。加えて、極めて微細なナノシート構造では、自由走行時のサブバンド間遷移が輸送特性に与える影響はそれほど大きくなく、無視できることを定量的に示した。矩形断面ナノシートの電子移動度の結晶方位依存性を包括的にシミュレーションし、特に (110) 基板では、チャネル方位によって移動度が大きく変調されることを示した。</p> <p>第6章では、本論文を通して得られた成果・知見を総括し、結論を述べた。</p>	

## 論文審査の結果の要旨及び担当者

氏 名 ( 岡 田 丈 )			
論文審査担当者	(職)	氏 名	
	主 査	教授	森 伸也
	副 査	教授	廣瀬 哲也
	副 査	教授	大岩 顕
	副 査	教授	小島 一信
	副 査	教授	森 勇介
	副 査	教授	片山 光浩
	副 査	教授	丸山 美帆子
	副 査	教授	尾崎 雅則
	副 査	教授	片山 竜二
	副 査	教授	近藤 正彦

## 論文審査の結果の要旨

本論文では、半導体ナノシートにおける電子輸送理論および数値計算技術を新規に開発し、得られた知見を述べている。具体的に提案されている新規手法は、(1) 半導体1次元構造の量子輸送計算を高速化する1次元等価モデル、(2) 半導体ナノシートにおいて表面ラフネス散乱で決定される平均自由行程を抽出する統計的手法、(3) 半導体ナノシートにおいて自由走行時のサブバンド間遷移を考慮したモンテカルロシミュレーションの3点である。

(1) 本論文で提案されている1次元等価モデルを用いることで、非平衡グリーン関数法に基づく量子輸送計算を、高効率に実行できることが実証されている。実際にさまざまな半導体1次元構造に1次元等価モデルを適用し、厳密な原子論モデルに基づく結果との比較が行われている。1次元等価モデルが、原子論モデルのバンド構造のうちフェルミ準位付近のバンド構造を、少数の基底を用いて表現可能であることが示されている。さらに輸送特性の計算を行い、1次元等価モデルに基づく高速な計算の結果が、原子論モデルに基づく厳密な計算の結果と、相対誤差数%の範囲で一致することが明らかにされている。また1次元等価モデルを用いることで、計算量を2桁程度削減できることが示されている。

(2) 本論文で提案されている統計的手法を用いて、表面ラフネス散乱で決定される平均自由行程のナノシート厚さ依存性が調べられている。平均自由行程は、ナノシートが厚い場合、ボルン近似から得られるよく知られた厚さの6乗に関する依存性を示す一方、ナノシートが薄い場合、依存性が弱くなることが明らかにされている。この結果は、自己無撞着ボルン近似に基づく結果と整合しており、提案されている統計的手法の妥当性を示している。自己無撞着ボルン近似に対する統計的手法の優位性として、ナノシートの幾何構造やラフネスパターンの統計モデルによらず、一般的に平均自由行程の抽出を行える点にあることが示されている。

(3) 逆有効質量テンソルの非対角成分が非ゼロの場合、量子閉じ込め効果により輸送方向の有効質量が重くなることを、数学的に証明している。また、Krieger-Iafrate (KI) 方程式に基づき自由走行時のサブバンド指数変化の解析を行い、逆有効質量テンソルの非対角成分がゼロの場合、サブバンド指数は不変である一方、非ゼロの場合、サブバンド指数が確率的に変化することを明らかにしている。さらに、KI 方程式から得たサブバンド間遷移確率を、従来のモンテカルロシミュレーションに取り入れる新手法が提案されている。この新手法が、従来法が抱える巨視的な系への漸近性に関する問題点を、改善していることが示されている。また、極めて微細なナノシート構造では、自由走行時のサブバンド間遷移が輸送特性に与える影響は小さく、無視できることを明らかにしている。

以上のように本論文は、次世代半導体デバイスの開発に必要な基盤となる電子輸送理論および計算技術に関する新たな知見を得るとともに、実用的なシミュレーション手法を提案し、その有用性を実証している。本研究の成果は、半導体デバイスのさらなる高性能化に貢献するものである。よって本論文は博士論文として価値あるものと認める。