



Title	モンテカルロ法による半導体中のキャリア輸送シミュレーションに関する研究
Author(s)	鎌倉, 良成
Citation	大阪大学, 2004, 博士論文
Version Type	VoR
URL	https://hdl.handle.net/11094/1859
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

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

The University of Osaka

モンテカルロ法による半導体中の キャリア輸送シミュレーションに関する研究

鎌倉良成

モンテカルロ法による半導体中の
キャリア輸送シミュレーションに関する研究

2003年

鎌倉良成

内容梗概

本論文は、筆者が大阪大学大学院工学研究科と日本電気株式会社マイクロエレクトロニクス研究所にて行ったモンテカルロ (MC) 法による半導体キャリア輸送シミュレーションに関する研究の成果をまとめたものであり、6 章から構成されている。以下、各章ごとに概要を述べる。

第 1 章は本論文の導入部とし、研究の背景と目的を述べる。

第 2 章では、フルバンド MC 法の基本概念を解説するとともに、その計算効率を改善するアルゴリズムの提案を行う。フルバンド MC 法は、半導体の現実的なエネルギー分散関係を参照テーブルとしてプログラムに組み込む、高精度なキャリア輸送シミュレーション法の一つである。本章では、同手法の基幹アルゴリズム、すなわち k 空間メッシュ分割法、エネルギー補間法、状態密度計算法に関する説明を行った後、最も計算時間を要する手続きであった散乱後の終状態選択部について改良を試みる。予め散乱先候補をメモリ上にリスト化する状態密度テーブル法を新たに導入することで、大幅な計算速度の高速化が実現できることを報告する。

第 3 章では、Si 中のホットホール解析用フルバンド MC シミュレータに取り入れる散乱モデルの精度検証を行う。Si 中のホットエレクトロン輸送に関しては、これまで数多くの実験とシミュレーションとの比較検証が行われ、その精度が確認されてきた。ところが、ホールに關しての状況は十分とは言えず、散乱確率の文献報告値にも大きな開きがあった。本研究では、従来利用されてきたドリフト速度とイオン化係数に加え、1 以上の量子生成成功率の実験値を利用することで、ホール-フォノン散乱確率とインパクトイオン化確率に対してより厳しい検証を加える。

第 4 章では、第 2, 3 章で開発・整備したフルバンド MC 法を MOSFET ゲート酸化膜の長期信頼性解析に応用した事例について述べる。これまで、酸化膜の絶縁破壊機構を説明するため用いられてきたアノードホールインжекシヨンモデルは、Fowler-Nordheim(FN) トンネリング注入法による信頼性試験を通じて得られたものであり、MOSFET のチャネルからホットエレクトロンが酸化膜に注入される状況下での適用可能性についてはあまり確認されてこなかった。本研究では、FN 注入法に加え、基板ホットエレクトロン注入法を用いてゲート酸化膜の絶縁破壊実験を行い、両者の実験結果がゲート酸化膜陽極端における電子エネルギーという観点で統一的に解釈可能であることを MC シミュレータを用いて実証する。

第 5 章では、アンサンブル MC/分子動力学法を利用して、バルク Si および MOSFET 反転層中での低電界電子移動度を解析する。 n MOSFET 中のチャネル電子輸送への応用を想定し、イオン化アクセプタ原子 (陰イオン) が分布する空間内の電子輸送を、粒子間 Coulomb 相互作用の影響を分子動力学的に考慮してシミュレートした。まず、シミュレーション結果の妥当性を検証するため、最も単純なバルク Si 系での電子輸送を解析した。従来の解析的不純物散乱モデルの結果とも比較し、その精度について議論を行う。続いて、本手法を 2 次元 MOS 系解析に応用するためのアルゴリズムを提案する。解析対象として、反転層電子移動度のロールオフ現象、極薄ゲート酸化膜 MOSFET におけるリモートイオン散乱効果を取り上げ、本シミュレーション手法の利点と限界について議論する。

第 6 章では、本論文で取り上げた各研究での成果についてまとめる。

目次

第1章	序論	1
1.1	モンテカルロ法とは	1
1.2	本研究の位置づけ	3
第2章	フルバンドモンテカルロシミュレータの高速化	7
2.1	はじめに	7
2.2	結晶中の電子状態の記述	8
2.3	フルバンドMCシミュレーションのための諸アルゴリズム	10
2.3.1	MCシミュレーションに必要な手続き	10
2.3.2	$E-k$ 関係テーブル化のための k 空間分割方法	11
2.3.3	エネルギーと群速度の補間方法	13
2.3.4	状態密度の計算方法	17
2.3.5	終状態の選択方法	18
2.4	シミュレーション実行速度の評価	22
2.5	まとめ	25
第3章	ホットホール散乱確率の精度検証	28
3.1	はじめに	28
3.2	シミュレーションモデル	29
3.2.1	フォノン散乱モデル	29
3.2.2	インパクトイオン化モデル	30
3.2.3	フルバンドMCシミュレーションの方法	31
3.3	ホール散乱確率の精度に関する従来の検証法	31
3.4	1以上の量子生成効率を用いたホットホール散乱確率の検証	36
3.4.1	実験方法	36
3.4.2	実験およびシミュレーション結果	37
3.5	まとめ	41
第4章	フルバンドモンテカルロシミュレータを利用したゲート酸化膜劣化の解析	44
4.1	はじめに	44
4.2	実験とシミュレーションの方法	46
4.2.1	使用した試料と実験方法	46
4.2.2	シミュレーション方法	48
4.3	結果と考察	48
4.3.1	酸化膜絶縁破壊の実験結果	49
4.3.2	電子エネルギー分布のシミュレーション結果	50

4.3.3	絶縁破壊実験結果の解釈	51
4.4	まとめ	53
第 5 章	アンサンブルモンテカルロ/分子動力学法による低電界電子移動度解析	57
5.1	はじめに	57
5.2	バルク p -Si 中の低電界電子移動度解析	58
5.2.1	シミュレーションの対象と方法	58
5.2.2	シミュレーション結果と考察	65
5.3	反転層電子移動度のロールオフ現象の解析	75
5.3.1	シミュレーション対象	75
5.3.2	シミュレーション方法	76
5.3.3	結果と考察	80
5.4	反転層移動度に対するリモートイオン散乱効果の解析	82
5.4.1	シミュレーション対象	82
5.4.2	シミュレーション方法	82
5.4.3	結果と考察	87
5.5	まとめ	95
第 6 章	結論	98
付 録 A	棄却法による終状態選択法	100
A.1	4 面体候補の探索法	100
A.2	終状態 4 面体の選択法	100
付 録 B	イオン化不純物散乱により律速される電子移動度の解析的導出法	104
	謝辞	107
	研究業績	109

第1章 序論

1.1 モンテカルロ法とは

モンテカルロ (MC) 法とは、乱数を用いたシミュレーションを何度も行なうことにより近似解を求める算法の総称である。古くは 18 世紀後半、図 1.1 のように、床に針をたくさんばら撒いて π の近似値を求めたという記録がある [1]。第 2 次大戦中、アメリカのロスアラモス国立研究所における原爆開発計画の中で、Fermi, Von Neumann, Ulam らは、核分裂性物質中の中性子拡散の様子を探るため MC 法を利用した。このとき彼らはこの手法のことを、カジノで有名なモナコの都市名にちなみ「モンテカルロ」というコードネームで呼んだが、これが名前の起源とされる [2]。同手法はその後、計算機の発展と共に急速な広がりを見せ、今では、物理学、生物学、最適化問題、金融など多種多様な分野で利用されている [3-5]。

1966 年、Kurosawa [6] によって、MC 法は半導体中の高電界キャリア輸送解析へと応用された。Boltzmann 輸送方程式を統計的・数值的に解くこのシミュレーション法を用いると、移動度などの実験量のみならず、キャリア分布関数のような測定が困難な物理量に対し高精度な解を得ることができる。またそのアルゴリズムは直感的で分かりやすく、複雑で高度な物理過程を組み込みやすい。欠点といえば、これは全ての MC 法に共通の問題なのだが、十分な解の精度を得るには多数回の試行を繰り返す必要がある (つまり計算時間がかかる) ことである。しかし、その後の自己散乱 [7] に代表される巧妙な効率的アルゴリズムの発見や、計算機処理能力の向上も手伝って、材料の基礎物性評価から、実際のデバイス設計に至る広範囲な半導体の問題に対し、MC 法は強力かつ実用的な解析手段となった [8]。

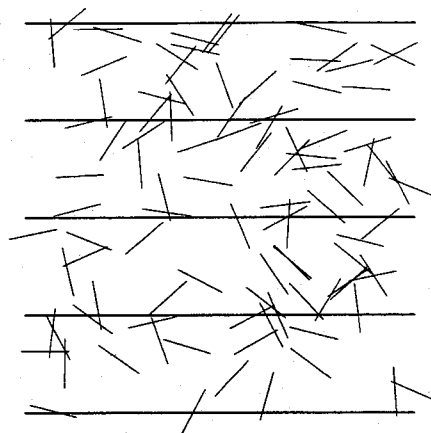


図 1.1: Buffon の針の実験。ここでは、間隔 $L = 1$ の平行線を引き、長さ $a = 0.5$ の針を 100 本ランダムに落とした。平行線と交差している針の割合を P とすると、 π の近似値は、 $2a/(LP)$ から求められる。今の場合、32 本の針が平行線と交わっているので、 $\pi \sim 3.125$ となる。

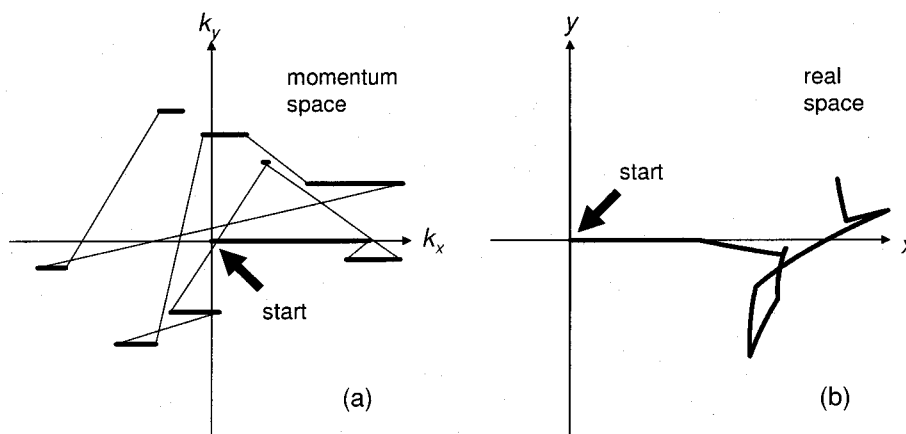


図 1.2: MC 法によるキャリア輸送解析の原理. (a) 運動量空間における 1 粒子の軌跡. x 正方向に電界が加わっている. 電界からの力を受けての自由走行 (太線) と, 散乱による瞬間的な運動量変化 (細線) の繰り返しによって粒子運動を表現する. 自由走行の持続時間や, 散乱後の終状態運動量を決定する際に, 理論的に与えられる確率分布に従った乱数を用いる. (b) 実空間における 1 粒子の軌跡. (a) の運動量の変化を時間積分することによって実空間内での軌跡が定まる.

図 1.2 に, キャリア輸送 MC シミュレーションの原理を示す [8, 9]. 運動量空間における粒子の追跡が基本であり, 外場からの力を受けての自由走行と, 散乱による瞬間的な運動量変化の繰り返しでキャリア運動を記述する. 自由走行の持続時間や, 散乱後の終状態運動量を決定する際に, 理論的に与えられる確率分布に従った乱数が使用される. 自由走行では, キャリアはエネルギーバンド構造を反映した古典的な運動の法則に従うものとし, 散乱手続きにおいては, 通常 Fermi 黄金則 [10] などを用いて量子力学的にその遷移確率が計算される. この際, どこまで高精度の物理モデルを取り込めるのかは, 計算コスト (処理速度, メモリなど) とのトレードオフによって定まる.

これまで, MC シミュレーションには, より高度な物理機構を取り入れた様々なバリエーションが登場してきた. 例えば, 1976 年 Jacoboni は, 多粒子を扱うアンサンブル MC シミュレーションに, 分子動力学の概念を取り入れたアンサンブル MC/分子動力学 (EMC/MD) 法を報告した [11]. 半導体中の荷電粒子間の Coulomb 相互作用, すなわちキャリア-キャリア間, キャリア-イオン化不純物間の散乱は, 移動度 [12] や分布関数 [13] に影響を与える重要な物理過程である. 普通これは, 2 体散乱, 1 次摂動といった近似計算から得られる遷移確率を用いて散乱機構の一種として MC 法に組み込まれるのだが [14, 15], EMC/MD 法では, 他の点電荷からの Coulomb 力の総和を自由走行時の外場成分として取り入れる [16–18]. これによって, 多体散乱, 動的遮蔽, 多イオン遮蔽などの高次効果を自動的にシミュレーションに反映させることが可能となる [17]. ただ, 本手法は, MD 部分の計算に膨大な時間を要する難点があり, 現時点で必ずしも広く活用される方法とはなっていない. 最近, 計算機の性能向上と相まって, 実際の半導体素子内部でのキャリア輸送解析に活用する試みも模索され始めており [19–22], 今後の発展が期待される.

1981 年には, バンド計算 [23] によって得られた現実的なエネルギーバンド構造を数値テーブルとしてプログラム中に取り込むフルバンド MC 法が, Shichijo と Hess により報告された [24]. 通常の MC シミュレータでは, エネルギーが運動量の 2 乗に比例する放物線型をもとに, 有効質量異方性や非放物線性などの補正を施した解析式バンド構造モデルが使用される [8]. しかし, 半導体への高電界印加によって発生するホットキャリアのエネルギーは 1 eV オーダーにも達すること

があり、そのような高エネルギー領域でのバンド構造は複雑な形状を有するため、解析モデルの精度が大変悪くなる。そこでフルバンド MC 法の登場となったわけだが、同時に散乱確率に対しても実験的・理論的検証が加えられ [25–31]、半導体中の高エネルギー粒子の解析精度が格段に向上した [32, 33]。本手法は、ある程度のメモリ領域が確保できれば、解析バンド MC 法と比較して遜色ない実行速度を実現できる [34–36]。これまで、多くの研究機関によってフルバンド MC シミュレータが開発され、実際にデバイス動作の解析にも使用されるなど [37–40]、広く浸透した方式となっている。

このほか最近では、素子微細化によって顕在化してくる量子効果を取り扱うため量子補正 MC 法の開発なども注目されている [41]。このように、30 年以上も前に半導体のキャリア輸送に応用された MC 法は、解くべき問題に応じて高度な物理モデルが組み込まれ、現在もなお進化を続けている。

1.2 本研究の位置づけ

本論文は、筆者が 1990 年代初頭から現在にかけて行ってきた、MC 法による半導体中のキャリア輸送シミュレーションに関する一連の研究成果 [21, 22, 31, 36, 40] をまとめたものである。1.1 節において挙げたキャリア輸送 MC 法の 2 つの発展形、すなわちフルバンド MC 法とアンサンブル MC/分子動力学法に対して、筆者らは、効率化や高精度化を目指した改良を加え、さらにそれらを活用することで Si-MOSFET に絡む諸問題を解析してきた。

MOSFET は、現在の半導体集積回路を構成する主要素子である [42]。Moore の法則 [43] として知られる LSI 性能向上の傾向は、現在もなお停滞の兆しを見せていない [44]。このように高度に発達した MOSFET 内部のキャリア挙動解析の中には、一般的に使用されているドリフト-拡散デバイスシミュレータ [45] で正確な取り扱いが難しい問題も多い。なかでもホットキャリア効果 [46] は、その代表例といえる。微細な Si-MOSFET 内部に加わる高電界は、電子を数 eV 程度まで加熱させ [37]、基板電流、ゲート電流、ゲート酸化膜劣化といった素子動作や信頼性に影響する種々の現象をもたらす [47]。本論文では、Si 基板中で発生するホットエレクトロン起因の酸化膜絶縁破壊機構を探るため、フルバンド MC シミュレータを活用した事例 [40] について述べる (第 4 章)。我々は、この解析を効率的かつ高精度に遂行するため、フルバンド MC シミュレーションの計算速度を向上させる方法を開発 [36] し (第 2 章)、さらに従来不確実性が強かったホットホール散乱モデルの構築 [31] を行った (第 3 章)。

低電界電子移動度は、10 nm 級の超微細 MOSFET においても、依然として、素子性能を左右する重要な指標とみなされている [48]。この移動度を決定付けるキャリア散乱機構としては、フォノン散乱、界面凹凸散乱のほか、イオン化不純物散乱が重要な因子に数えられる。特に、極微細 MOSFET においては、電子の走行するチャネル部のイオンのみならず、ソース [48] やゲート [49–52] 等、チャネルから離れた領域内のいわゆる「リモートイオン」が移動度を深刻に低下させるとの報告もある。筆者は、EMC/MD 法が将来的に、極微細 MOSFET 内部におけるこれら複雑な Coulomb 散乱過程を、高精度かつ実用的に解析する手段となり得るのではと考えている。というのは、計算機処理能力の向上と、解析対象である素子内部に含まれる電荷数が微細化のため減少すること (MD の計算時間は粒子数の 2 乗に比例する)、の 2 つの相乗効果により計算速度の高速化が望めるからである。本論文では、EMC/MD 法を n MOSFET 中の反転層電子輸送解析に応用する (第 5 章)。対象として、バルク電子輸送、反転層電子移動度のロールオフ現象 [22]、極薄ゲート酸化膜 MOSFET におけるリモートイオン散乱効果 [21] を取り上げ、本手法の利点と限界について議論する。

参考文献

- [1] 物理学大辞典編集委員会 編, 物理学大辞典, 丸善, 1989.
- [2] N. Metropolis and S. Ulam, J. American Statistical Association **44**, 335 (1949).
- [3] ハーベイ・ゴールド, ジャン・トボチニク 著, 鈴木 増雄 監訳, 溜渕 継博 監翻訳, 石川 正勝, 宮島 佐介 訳, 計算物理学入門, ピアソン・エデュケーション, 2000.
- [4] 宮武 修, 脇本 和昌, 乱数とモンテカルロ法, 森北出版, 1978.
- [5] デービッド・G・ルーエンバーガー 著, 今野 浩, 鈴木 賢一, 枇々木 規雄 訳, 金融工学入門, 日本経済新聞社, 2002.
- [6] T. Kurosawa, Proc. 8th Int. Conf. Phys. of Semiconductors, Kyoto, 1966.
- [7] H.D. Rees, Phys. Lett. **26A**, 416 (1968).
- [8] C. Jacoboni and P. Lugli, *The Monte Carlo Method for Semiconductor Device Simulation*, p. 133, Springer-Verlag, Wien, New York, 1989.
- [9] C.M. スノーデン 著, 浜口 智尋, 谷口 研二 訳, 半導体デバイスのモデリング 《物理モデルと素子特性の解析》, 第8章, 現代工学社, 1987.
- [10] 阿部 龍蔵, 電気伝導, 第8章, 培風館, 1969.
- [11] C. Jacoboni, Proc. 13th Int. Conf. Phys. of Semiconductors, Roma, 1976.
- [12] M.V. Fischetti, Phys. Rev. B **44**, 5527 (1991).
- [13] A. Abramo and C. Fiegna, J. Appl. Phys. **80**, 889 (1996).
- [14] N. Takenaka, M. Inoue, and Y. Inuishi, J. Phys. Soc. Japan **47**, 861 (1979).
- [15] T.G. Van de Roer and F.P. Widdershoven, J. Appl. Phys. **59**, 813 (1986).
- [16] C. Jacoboni and P.J. Price, Solid-State Electron. **31**, 649 (1988).
- [17] R.P. Joshi and D.K. Ferry, Phys. Rev. B **43**, 9734 (1991).
- [18] M. Moško, V. Cambel, and A. Mosková, Phys. Rev. B **46**, 5012 (1992).
- [19] C.J. Wordelman and U. Ravaioli, IEEE Trans. Electron Devices **47**, 410 (2000).
- [20] W.J. Gross, D. Vasileska, and D.K. Ferry, IEEE Trans. Electron Devices **47**, 1831 (2000).

- [21] I. Kawashima, Y. Kamakura, and K. Taniguchi, Tech. Dig. IEDM, p. 113, San Francisco, 2000.
- [22] Y. Kamakura, H. Ryouke, and K. Taniguchi, IEICE Trans. Electron. **E86-C**, 357 (2003).
- [23] M.L. Cohen and T.K. Bergstresser, Phys. Rev. **141**, 789 (1966).
- [24] H. Shichijo and K. Hess, Phys. Rev. B **23**, 4197 (1981).
- [25] *Monte Carlo Device Simulation: Full Band and Beyond*, edited by K. Hess, Kluwer Academic, Boston, 1991.
- [26] E. Cartier, M.V. Fischetti, E.A. Eklund, and F.R. McFeely, Appl. Phys. Lett. **62**, 3339 (1993).
- [27] P.D. Yoder, V.D. Natoli, and R.M. Martin, J. Appl. Phys. **73**, 4378 (1993).
- [28] T. Kunikiyo, M. Takenaka, Y. Kamakura, M. Yamaji, H. Mizuno, M. Morifuji, K. Taniguchi, and C. Hamaguchi, J. Appl. Phys. **75**, 297 (1994).
- [29] Y. Kamakura, H. Mizuno, M. Yamaji, M. Morifuji, K. Taniguchi, C. Hamaguchi, T. Kunikiyo, and M. Takenaka, J. Appl. Phys. **75**, 3500 (1994).
- [30] T. Kunikiyo, M. Takenaka, M. Morifuji, K. Taniguchi, and C. Hamaguchi, J. Appl. Phys. **79**, 7718 (1996).
- [31] Y. Kamakura, I. Kawashima, K. Deguchi, and K. Taniguchi, J. Appl. Phys. **88**, 5802 (2000).
- [32] A. Abramo, L. Baudry, R. Brunetti, R. Castagne, M. Charef, F. Dessenne, P. Dollfus, R. Dutton, W.L. Engl, R. Fauquembergue, C. Fiegna, M.V. Fischetti, S. Galdin, N. Goldman, M. Hackel, C. Hamaguchi, K. Hess, K. Hennacy, P. Hesto, J.M. Higman, T. Iizuka, C. Jungemann, Y. Kamakura, H. Kosina, T. Kunikiyo, S.E. Laux, H. Lin, C. Maziar, H. Mizuno, H.J. Peifer, S. Ramaswamy, N. Sano, P.G. Scrobohaci, S. Selberherr, M. Takenaka, T.-W. Tang, K. Taniguchi, J.L. Thobel, R. Thoma, K. Tomizawa, M. Tomizawa, T. Vogel-sang, S.-L. Wang, X. Wang, C.-S. Yao, P.D. Yoder, and A. Yoshii, IEEE Trans. Electron Devices **ED-41**, 1646 (1994).
- [33] M.V. Fischetti, S.E. Laux, and E. Crabbé, J. Appl. Phys. **78**, 1058 (1995).
- [34] J. Bude and R.K. Smith, Semicond. Sci. Technol. **9**, 840 (1994).
- [35] C. Jungemann, S. Yamaguchi, and H. Goto, Proc. 26th European Solid State Device Research Conference, p. 821, Bologna, 1996.
- [36] 鎌倉 良成, 飯塚 貴弘, 山本 佳史, 田中 克彦, 松本 比呂志, 第 43 回応用物理学関係連合講演会, 27a-G-3, 1996.
- [37] M.V. Fischetti and S.E. Laux, Phys. Rev. B **38**, 9721 (1988).
- [38] J.D. Bude, M. Mastrapasqua, IEEE Electron Device Letters **16**, 439 (1995).
- [39] R. Oberhuber, G. Zandler, and P. Vogl, Phys. Rev. B **58**, 9941 (1998).

- [40] Y. Kamakura, A. Ishida, and K. Taniguchi, *Physica B* **272**, 532 (1999).
- [41] H. Tsuchiya and U. Ravaioli, *J. Appl. Phys.* **89**, 4023 (2001).
- [42] P.S. Peercy, *Nature* **406**, 1023 (2000).
- [43] G.E. Moore, *Electronics* **38**, 114 (1965).
- [44] G.E. Moore, *Int. Solid-State Circuits Conference*, San Francisco, 2003.
- [45] 壇 良 編, 和田 哲典 著, プロセス・デバイスシミュレーション技術 第3章, 産業図書, 1988.
- [46] 武田 英次, ホットキャリア効果, 日経マグローヒル社, 1987.
- [47] 小柳 光正, サブミクロンデバイス I / サブミクロンデバイス II, 丸善, 1988.
- [48] D.A. Antoniadis, *VLSI Symp. Tech. Dig.*, p. 2, Hawaii, 2002.
- [49] M.S. Krichnan, Y.C. Yeo, Q. Lu, T.-J. King, J. Bokor, and C. Hu, *Tech. Dig. IEDM*, p. 571, San Francisco, 1998.
- [50] M. S. Krishnan, L. Chang, T.-J. King, J. Bokor, and C. Hu., *IEDM Tech. Dig.*, p. 241, Washington, DC, 1999.
- [51] N. Yang, W. K. Henson, J. R. Hauser, and J. J. Wortman, *IEEE Trans. Electron Devices* **47**, 440 (2000).
- [52] S. Takagi and M. Takayanagi, *Ext. Abst. SSDM*, p. 378, Tokyo, 2001.

第2章 フルバンドモンテカルロシミュレータの高速化

2.1 はじめに

フルバンドモンテカルロ (MC) 法は, 1981 年 Shichijo と Hess [1] により, GaAs 中の高電界電子輸送解析に初めて用いられて以来, 半導体中のキャリア輸送を高精度にシミュレーションする手段として広く利用されてきた [2-8]. この手法は, 擬ポテンシャル法 [9] などのエネルギーバンド計算によって得られた現実的な E - k 関係を, 参照テーブルとしてプログラムに組み込むことで, 解析式による記述が困難な複雑なバンド構造をキャリア輸送シミュレーションに反映させる. 例えば, Si に数百 kV/cm もの高電界を印加した際, 発生する高エネルギー電子の分布を正確に見積もるには, フルバンド構造の導入が不可欠である [10]. 実際, 微細な Si-MOSFET では, 内部の高電界によって電子が数 eV 程度まで加熱されることがあるが [2], それらが引き起こす, 基板電流 [6], ゲート電流 [5], ゲート酸化膜劣化 [7, 8] といった, 種々のホットエレクトロン効果に対し, フルバンド MC シミュレーションは強力な解析手段となってきた. さらに, ホールにおいては, 低エネルギー領域においてでさえバンド構造は複雑な形状を有するため, フルバンド手法の導入はより本質的であると目されている [11, 12].

このように, 計算精度の面では, その導入が望ましいフルバンド法なのだが, 従来のバンド構造を解析式で表現した MC 法 (以降では解析バンド MC 法と呼ぶ) [13] と比べ, プログラムのコーディングが煩雑, またメモリや CPU 時間などの計算資源を大量消費する, といった問題点があった. 特に後者は, 実際のデバイス開発現場での活用を視野に入れた場合, 非常に重要視されるポイントであり, 計算機性能の向上を待たずとも, プログラミング上の工夫で少しでも解決できるのであれば, 高度で実用的なシミュレーション環境をいち早く技術者に提供することが可能となる.

フルバンド MC 法の計算時間を律速する部分は, キャリア散乱後の終状態選択の手続きであり, これに対しては, いくつかの高速化手法がこれまで提案されてきた. たとえば, Bude らは, k 空間の等エネルギー面上に格子点を持つような特殊なメッシュを張る (phase-space simplex 法) ことで, 電子エネルギーと波数ベクトルの対応関係を高速に検索できるようにした [14]. 一方, Jungemann らは, そのような特殊なメッシュ分割技術を用いなくとも, 簡便な等間隔格子を用いたコードを高速化することのできる, 乱数棄却法による終状態選択アルゴリズムを考案した [15].

本章では, Jungemann アルゴリズムと同時期に筆者らが提案した高速化手法 [16] を中心に, フルバンド MC シミュレータのアルゴリズムを解説する. この方法は, エネルギー値を与えて波数ベクトルを返す表をメモリ上に作成しておくことで, 終状態選択の効率を目指したものであり, Bude と Jungemann のアルゴリズムのちょうど中間に位置づけられるものと言える. すなわち, k 空間分割には等間隔正方格子を用い, また乱数棄却法を用いないため, 棄却回数の増加による終状態選択の非効率化は起こらない. 本章では, まず, 2.2 節にてフルバンド MC 法に必要な知識の整理を行う. 続いて, 2.3 節にて, 諸計算アルゴリズムの詳しい解説を行ったのち, 2.4 節では, 実際に MC デバイスシミュレーションを実行して, 今回のアルゴリズムの計算速度を評価する. そして,

最後に 2.5 節にてまとめとする。

2.2 結晶中の電子状態の記述

バルク結晶中の電子状態は、量子数として、3次元の波数ベクトル $\mathbf{k}$ 、バンド番号 n 、およびスピン σ を用いて指定される。それぞれの電子状態に対し、エネルギー固有値 $E_{n\mathbf{k}\sigma}$ が 1 つ対応する。本研究においては、輸送特性に与えるスピンの影響を考慮せず、エネルギー固有値がスピンの対して縮退している場合のみを取り扱う。以降の記述では、電子状態の指定に際し、特に σ を明示しないこととする。

図 2.1 に示すように、Si の実空間における単位格子は、次の 3 つの基本並進ベクトルに囲まれた領域となる。

$$\mathbf{a} = \frac{a}{2}(\mathbf{i}_x + \mathbf{i}_y), \quad \mathbf{b} = \frac{a}{2}(\mathbf{i}_y + \mathbf{i}_z), \quad \mathbf{c} = \frac{a}{2}(\mathbf{i}_z + \mathbf{i}_x) \quad (2.1)$$

ここで、 a は格子定数、 $\mathbf{i}_x, \mathbf{i}_y, \mathbf{i}_z$ はそれぞれ x, y, z 方向の単位ベクトルである。一方、 k 空間で定義される逆格子は、次の 3 つの基本並進ベクトル

$$\mathbf{g}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{b} \times \mathbf{c}}{\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})} = \frac{2\pi}{a}(\mathbf{i}_x + \mathbf{i}_y - \mathbf{i}_z) \quad (2.2)$$

$$\mathbf{g}_2 = 2\pi \frac{\mathbf{c} \times \mathbf{a}}{\mathbf{b} \cdot (\mathbf{c} \times \mathbf{a})} = \frac{2\pi}{a}(-\mathbf{i}_x + \mathbf{i}_y + \mathbf{i}_z) \quad (2.3)$$

$$\mathbf{g}_3 = 2\pi \frac{\mathbf{a} \times \mathbf{b}}{\mathbf{c} \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b})} = \frac{2\pi}{a}(\mathbf{i}_x - \mathbf{i}_y + \mathbf{i}_z) \quad (2.4)$$

から形成され、一般の逆格子ベクトル $\mathbf{G}$ は

$$\mathbf{G} = l_1 \mathbf{g}_1 + l_2 \mathbf{g}_2 + l_3 \mathbf{g}_3 \quad (2.5)$$

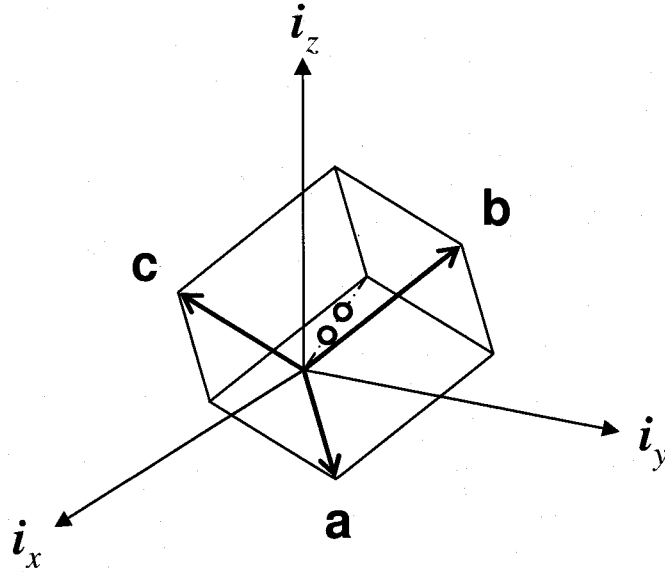


図 2.1: Si 結晶の単位格子。 $\mathbf{a} = (a/2)(\mathbf{i}_x + \mathbf{i}_y)$, $\mathbf{b} = (a/2)(\mathbf{i}_y + \mathbf{i}_z)$, $\mathbf{c} = (a/2)(\mathbf{i}_z + \mathbf{i}_x)$ である。ただし、 $\mathbf{i}_x, \mathbf{i}_y, \mathbf{i}_z$ はそれぞれ x, y, z 軸方向の単位ベクトルである。図中の白丸は原子の位置を示しており、 $\tau = (a/8)(\mathbf{i}_x + \mathbf{i}_y + \mathbf{i}_z)$ とおくと、 $(\mathbf{a} + \mathbf{b} + \mathbf{c})/2 \pm \tau$ の位置に存在する。

のように表される。ここで、 l_1, l_2, l_3 は整数である。還元ゾーン形式では、 $\mathbf{k}$ のとり得る値は、第 1-Brillouin ゾーン (BZ) 内のみに限定される。原点と任意の逆格子点との 2 等分面をとったときに、原点を中心として平面で囲まれる最小の単位が第 1BZ であり、Si の場合、図 2.2 のようになる。これを式で表すならば

$$\begin{cases} |k_x|, |k_y|, |k_z| < \frac{2\pi}{a} \\ |k_x| + |k_y| + |k_z| < \frac{3}{2} \cdot \frac{2\pi}{a} \end{cases} \quad (2.6)$$

となる。

量子化のため $\mathbf{k}$ は離散値をとる。結晶が 1 辺の長さ L の立方体だったとしよう。周期的境界条件を仮定して波動関数の連続条件を考慮すると、簡単な計算から $\mathbf{k}$ の値は

$$k_x, k_y, k_z = 0, \pm \frac{2\pi}{L}, \pm 2 \frac{2\pi}{L}, \pm 3 \frac{2\pi}{L}, \dots \quad (2.7)$$

に限られることが示される。したがって、 k 空間体積 $(2\pi/L)^3$ あたり 1 個の割合で $\mathbf{k}$ が存在することになる。第 1BZ に含まれる $\mathbf{k}$ の総数を計算すると、

$$\frac{\frac{1}{2} \left(\frac{4\pi}{a} \right)^3}{\left(\frac{2\pi}{L} \right)^3} = \frac{L^3}{\left(\frac{a^3}{4} \right)} \equiv N_{\text{cell}} \quad (2.8)$$

が得られる。ここで、左辺の分子は第 1BZ の k 空間体積、また、右辺の分子と分母は、それぞれ結晶と Si 単位の格子の実空間体積に等しい。すなわち、式 (2.8) は、バンド 1 本、スピン 1 方向あたりの電子状態数が、ちょうど結晶内部に含まれる単位の格子の総数 N_{cell} と同じであることを示している。

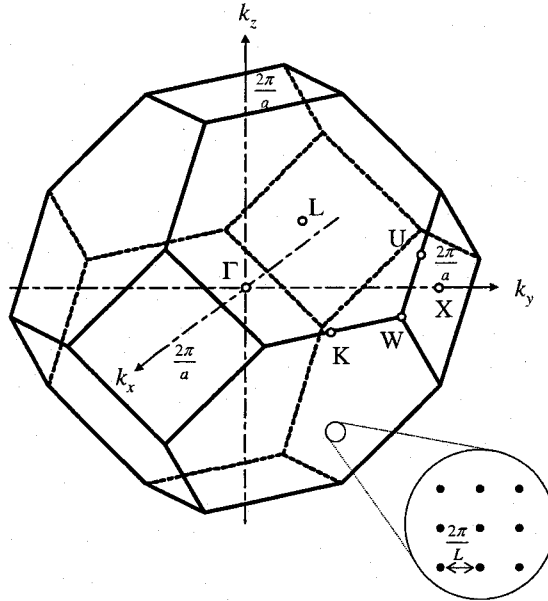


図 2.2: Si 結晶の第 1-Brillouin ゾーン。

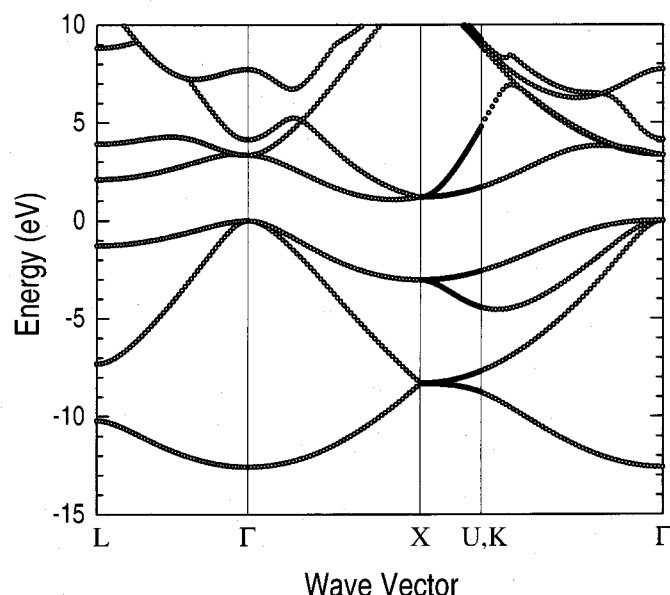


図 2.3: 経験的擬ポテンシャル法により計算した Si のエネルギーバンド構造. エネルギーの低いものから数えて 9 本目 (価電子帯 4 本, 伝導帯 5 本) のバンドまでをプロットした. エネルギーの原点は, Γ 点における価電子帯の頂上にとっている.

図 2.3 に, 経験的擬ポテンシャル法 [4, 9] で計算した Si のエネルギーバンド図を示す. Si^{4+} (Si 原子核+内殻電子) イオンの擬ポテンシャルを経験的に仮定し, Schrödinger 方程式を解くことでエネルギー固有値を得る. なお, エネルギーバンド図とは, 3次元波数ベクトルの関数としてのエネルギー固有値を 2次元の紙面上に表示した図面である. 図 2.2 中の, X, Γ , L, などと名づけられた k 空間内部の対称点間を結ぶ線上の k を横軸に, また縦軸にはその k を有し, 異なる n を持つ状態のエネルギー固有値を複数の点でプロットする. 実際にはスピン縮退があるため, 図 2.3 では, 1つの点が, スピン上下の 2状態に対応している.

図 2.1 で示したように, Si 結晶は単位格子あたり 2 個の原子を含む. Si 原子 1 個が供給する価電子数は 4 なので, すべての価電子の空間的運動を記述するために必要な空間座標ベクトルは全部で $8N_{\text{cell}}$ 個となる. それらをフーリエ変換した逆格子空間においても事情は変わらず, 全価電子の状態記述には $8N_{\text{cell}}$ 個の波数ベクトルを用意しなければならない. 電子はフェルミ粒子であり, 1つの状態は 1 個の電子のみしか占有できず, 同一バンドおよびスピンを持った状態数は N_{cell} 個ある. さらに, エネルギー固有値はスピンに対し縮退していることを思い起こすと, 図 2.3 のバンド図において, 下から数えて 4 本目までが価電子帯を表していることとなる.

2.3 フルバンド MC シミュレーションのための諸アルゴリズム

2.3.1 MC シミュレーションに必要な手続き

フルバンド MC 法におけるキャリア運動追跡のための基本アルゴリズムは, 従来の MC 法による Boltzmann 輸送方程式の解法 [13] と全く同様である. すなわち, 電界のもとでの自由走行, および散乱による電子状態 $(\mathbf{k}, n)$ の変化, の確率的事象を計算機上で多数回繰り返し, その統計平均から輸送特性を抽出する.

自由走行では、次の運動方程式にしたがって、電子の波数ベクトル $\mathbf{k}$ と位置ベクトル $\mathbf{r}$ を変化させる。

$$\frac{d\mathbf{k}}{dt} = -\frac{e\mathbf{F}}{\hbar} \quad (2.9)$$

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_{n\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}} \quad (2.10)$$

ここで、 $\mathbf{F}$ は電界である。自由走行ではバンド番号 n は変化させない。また、もし、 $\mathbf{k}$ が、式 (2.9) によって第 1BZ からはみ出るようなことがあれば、 $\mathbf{k}$ に適当な逆格子ベクトル $\mathbf{G}$ を加えることで、再び第 1BZ 内に差し戻す。

続いて、あらかじめ与えられる散乱確率:

$$S_m(\mathbf{k}, n) = \sum_{\mathbf{k}', n'} S_m(\mathbf{k}, n; \mathbf{k}', n') \quad (2.11)$$

にしたがって、複数の散乱過程 (自己散乱も含む) の中から、1 つの散乱過程を選択する。ここで、 m は散乱過程の種類、 $S_m(\mathbf{k}, n; \mathbf{k}', n')$ は始状態 $(\mathbf{k}, n)$ から終状態 $(\mathbf{k}', n')$ へ電子が散乱される確率である。散乱過程が定まると、エネルギー保存則

$$E_{n'\mathbf{k}'} = E_{n\mathbf{k}} + \Delta E(\mathbf{k}, n; \mathbf{k}', n') \quad (2.12)$$

を満足する終状態候補 $(\mathbf{k}', n')$ の中から、ランダムに 1 状態を選択する。ここで、 $\Delta E(\mathbf{k}, n; \mathbf{k}', n')$ は、散乱前後のエネルギー変化量である。

なお、メモリ量の節約のため、実際のプログラムでは、散乱確率を等エネルギー面上で平均化したエネルギーのみの関数として表した

$$S_m(E) = \frac{\sum_{\mathbf{k}, n} S_m(\mathbf{k}, n) \delta(E_{n\mathbf{k}} - E)}{\sum_{\mathbf{k}, n} \delta(E_{n\mathbf{k}} - E)} \quad (2.13)$$

が、用いられることが多く、本研究でもこの近似を施した。実際に MC シミュレーションを行うと、キャリア分布が k 空間全体に広がるため、こういった近似を施しても結果に重大な影響を与えることはほとんどない [17]。

フルバンド MC シミュレーションにおいて、上記手続きを実行するには、以下のような関数が必要となる。

1. 波数ベクトル $\mathbf{k}$ とバンド番号 n を与えた時に、エネルギー値 $E_{n\mathbf{k}}$ を返す関数
2. エネルギー E を与えた時に、そのエネルギー値を有する状態がどの程度結晶に含まれるのかを表す状態密度を返す関数
3. 電子状態 $(\mathbf{k}, n)$ を与えた時に、 $E_{n'\mathbf{k}'} = E_{n\mathbf{k}} + \Delta E(\mathbf{k}, n; \mathbf{k}', n')$ を満たす電子状態 $(\mathbf{k}', n')$ の中から、確率分布 $S(\mathbf{k}, n; \mathbf{k}', n')$ にしたがって、1 つの状態を選択する関数

以降では、これら関数の詳細を順に説明していくこととする。

2.3.2 $E - k$ 関係テーブル化のための k 空間分割方法

MC シミュレーションの実行中には、電子状態番号 $(\mathbf{k}, n)$ を与えて $E_{n\mathbf{k}}$ を返す手続きが無数に呼び出される。エネルギーバンド構造の計算には、経験的擬ポテンシャル法のような非第一原理的モデルを用いたとしても相当の時間を要するので、逐一バンド計算を行うことは、全く現実的でな

い。そこで、あらかじめ計算したバンド構造に関する情報を、テーブルとしてメモリ内に格納し、それを随時参照することで $E_{n\mathbf{k}}$ を獲得する手法が用いられる。本研究では、 k 空間第 1BZ を多数の 4 面体に分割したうえで、各 4 頂点のエネルギー値をメモリに保存し、任意の $\mathbf{k}$ に対応するエネルギー値を線形補間で求める方式を用いた¹。そして、この線形補間によるエネルギーバンド構造をすべての基本に、後に順次説明する状態密度計算や散乱後の終状態選択、といった各種手続きに関するアルゴリズムが築かれる。この節では、まず k 空間の 4 面体分割法について説明する。

k 空間を格子に分割し、各格子点のエネルギー値をメモリに格納するわけだが、エネルギーバンド構造の対称性を考慮することで、メモリ使用量の大幅節約が可能である。まず、符号反転に対する対称性:

$$E_n(k_x, k_y, k_z) = E_n(\pm k_x, \pm k_y, \pm k_z) \quad (2.14)$$

を利用することで、 $1/2^3 = 1/8$ の領域のみのテーブルを作れば良いこととなる。さらに、 k 座標の入れ替えに対する対称性:

$$\begin{aligned} E_n(k_x, k_y, k_z) &= E_n(k_y, k_z, k_x) = E_n(k_z, k_x, k_y) \\ &= E_n(k_x, k_z, k_y) = E_n(k_z, k_y, k_x) = E_n(k_y, k_x, k_z) \end{aligned} \quad (2.15)$$

を用いると、その領域はさらに $1/(3P_3) = 1/6$ だけ縮小される。すなわち、これらの関係を用いることで、第 1BZ の $1/48$ の体積、具体的には、例えば

$$k_x, k_y, k_z > 0, \quad k_x > k_y > k_z \quad (2.16)$$

を満たす領域内のみのエネルギー分散関係を記憶するだけで、全領域に対応することが可能である。ただし、本研究では、後述する格子の 4 面体分割アルゴリズムを簡単なものとするため、式 (2.15) で表される座標入れ替えに対する対称性は利用せず、第 1BZ の $1/8$ ($k_x, k_y, k_z > 0$) をエネルギーテーブル作成領域と定めた。

それでは、テーブル作成の第 1 段階として、 k 空間を等間隔メッシュで分割しよう。本研究では、メッシュの細かさの指標として Γ -X 点間の分割数を考え、それを N_{div} と表記する。図 2.4 は、 $N_{\text{div}} = 4$ の場合の分割結果である。1/8-第 1BZ が、同じ体積の立方体で埋めつくされていることが分かる。第 1BZ の斜めの境界面 ($k_x + k_y + k_z = 1.5 \cdot 2\pi/a$) から、一部がはみ出している立方体が存在しているが、このはみ出し部分をうまく処理するよう、立方体をさらに 4 面体に分割する。

図 2.5 は、立方体の 4 面体への分割方法を示している。立方体 1 つから、6 個の 4 面体が切り出される。ちょうど、第 1BZ の斜めの面と合致する切り口が現れるように、分割方法を工夫している点に注意してほしい。図 2.4 における全ての立方体を、図 2.5 で説明した方法で 4 面体分割し、第 1BZ からはみ出した 4 面体を取り除いた結果を、図 2.6 に示す。1/8-第 1BZ 全体が、4 面体によってちょうど埋めつくされていることが分かる。

シミュレータでは、図 2.6 のように全格子点におけるエネルギー固有値をテーブル化し保持することとなる。ここで、必要メモリ量を見積もる際に便利のように、格子点数、立方体数、4 面体数と N_{div} の関係をまとめておこう。まず、1/8-第 1BZ に含まれる全格子点数 N_g と N_{div} の関係は、簡単な計算から

$$N_g = \frac{1}{8}(4N_{\text{div}}^3 + 15N_{\text{div}}^2 + 18N_{\text{div}} + 8) \quad (2.17)$$

¹本来 E - k 関係は、ほぼ 2 次の関数であり、2 次補間を用いたフルバンド MC も報告されている [2]。本研究では、 $\mathbf{k}$ から E の対応関係、その逆 E から $\mathbf{k}$ の指定 (等エネルギー面探索)、および状態密度計算、などの統一的な取り扱いが容易な線形補間を採用した。ただし、この場合、特に低エネルギー領域の補間誤差を回避するため、細かなメッシュ分割を要するデメリットがある。

となることが分かる．一方，立方体数 N_c は，

$$N_c = \frac{1}{4}(2N_{\text{div}}^3 + 3N_{\text{div}}^2) \quad (2.18)$$

であり，4 面体数 N_t は

$$\begin{aligned} N_t &= N_{\text{div}}^3 \times 6 \times \frac{1}{2} \\ &= 3N_{\text{div}}^3 \end{aligned} \quad (2.19)$$

で与えられる．なお，シミュレーションの際，複数のエネルギーバンドを考慮するのであれば，当然その本数分だけのテーブルを用意しなければならない．

2.3.3 エネルギーと群速度の補間方法

2.3.2 節で分割した格子をもとにして，任意の状態のエネルギーをシミュレーション中に高速に決定する方法を説明する．本研究では，状態密度計算等に用いられる 4 面体法 [18] を基に，線形補間により E - k 関係の離散化を図った．

まず準備として，図 2.5 のように，立方体内部座標 (x, y, z) を次のように導入する．

$$x = \frac{k_x - k_{x0}}{2\pi/(aN_{\text{div}})}, \quad y = \frac{k_y - k_{y0}}{2\pi/(aN_{\text{div}})}, \quad z = \frac{k_z - k_{z0}}{2\pi/(aN_{\text{div}})} \quad (2.20)$$

ここで， (k_{x0}, k_{y0}, k_{z0}) は，立方体の 8 頂点のうち，もっとも原点に距離が近い点の波数ベクトルである．立方体内部のエネルギーは，各頂点のエネルギー値をもとに，次の座標値に対する 1 次式で再定義される．

$$E(x, y, z) = Ax + By + Cz + D \quad (2.21)$$

この式の未知数は 4 つである．したがって，座標値 (x, y, z) とそれに対応するエネルギー値 $E(x, y, z)$ の組を 4 とおり与えてやれば，4 元連立方程式を解くことで係数 A, B, C, D は一意に定まる．この 4 つの座標値として，4 面体の各頂点を用いるのである．

図 2.5 の方法で分割した 6 種類の 4 面体を，図 2.7 のように type1 から type6 と分類することにする．すると，4 係数 A, B, C, D の値は，4 面体の種類によって異なり，表 2.1 のようにまと

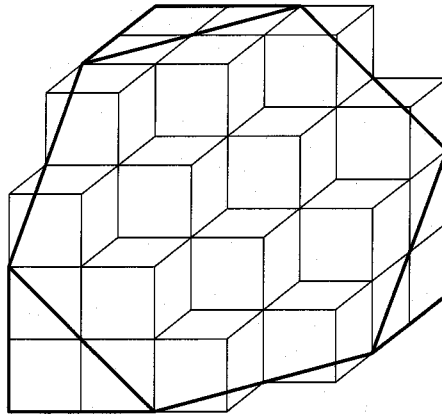


図 2.4: $1/8$ -第 1BZ の立方体分割．太線は第 1BZ(ただし， $k_x, k_y, k_z > 0$) の境界線である．この例では， Γ -X 点間の分割数 N_{div} が 4 の場合を示した．

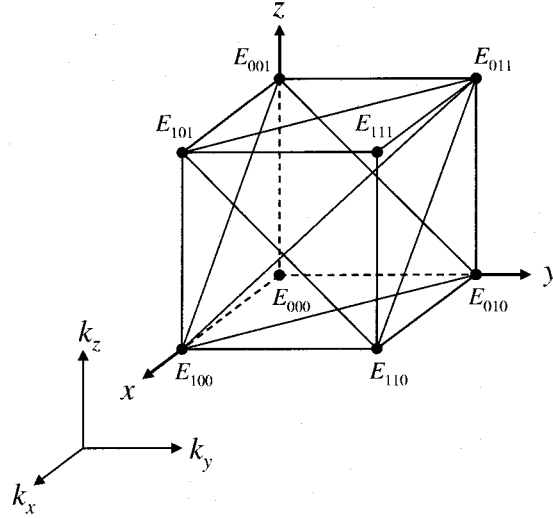


図 2.5: 立方体から 4 面体への分割方法. 1 つの立方体から 6 個の 4 面体が切り出される. 第 1BZ の境界面: $k_x + k_y + k_z = 1.5 \cdot 2\pi/a$ と整合するような分割法を選んだ. 立方体内座標系 (x, y, z) を図中のように定義する. これは, 立方体の 8 頂点のうち最も k 空間の原点 (Γ 点) 近い点を原点にとり, さらに立方体の 1 辺を単位長さとしたものである. さらに, 各頂点のエネルギー値を, 図中の E_{000} から E_{111} のようにラベル付ける.

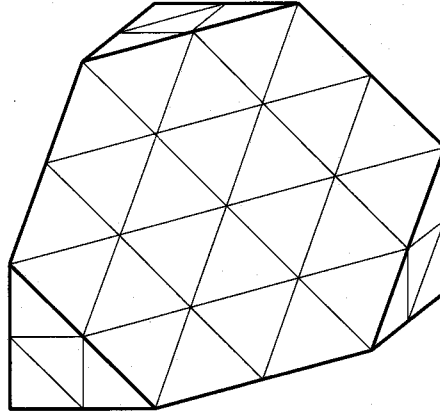


図 2.6: 1/8-第 1BZ の 4 面体分割. $N_{\text{div}} = 4$ の場合を示した. 図 2.4 中の各立方体を, 図 2.5 で説明した方法で 4 面体分割し, 第 1BZ からはみ出している 4 面体を除外した.

められる. なお, 任意の座標値 (x, y, z) がどの 4 面体に属しているのかは, 表 2.2 に示すアルゴリズムより簡単に判別することができる.

群速度 $\mathbf{v}_g$ は, 式 (2.21) を座標値に対して微分することで得られ,

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_g &= \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial \mathbf{k}} \\ &= \frac{aN_{\text{div}}}{2\pi\hbar} (A, B, C) \end{aligned} \quad (2.22)$$

となる.

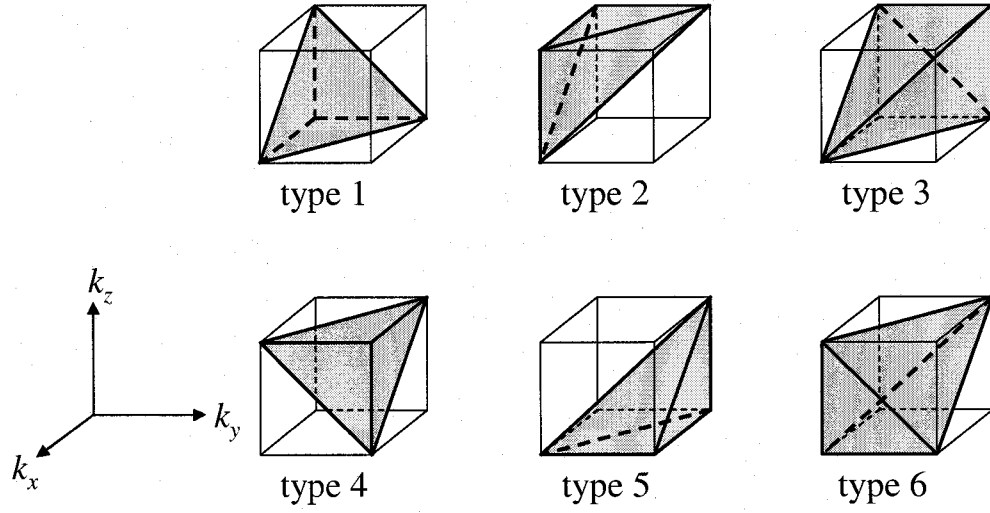


図 2.7: 立方体から切り出される 4 面体の分類. それぞれ, type1~type6 と名づける.

表 2.1: 4 面体内部の状態のエネルギー値を, 式 (2.21) のように線形補間で近似するとき用いる係数.

	A	B	C	D
type1	$E_{100} - E_{000}$	$E_{010} - E_{000}$	$E_{001} - E_{000}$	E_{000}
type2	$E_{101} - E_{001}$	$E_{011} - E_{001}$	$E_{101} - E_{100}$	$E_{100} + E_{001} - E_{101}$
type3	$E_{100} + E_{011} - E_{010} - E_{001}$	$E_{011} - E_{001}$	$E_{011} - E_{010}$	$E_{010} + E_{001} - E_{011}$
type4	$E_{110} + E_{101} - E_{100} - E_{011}$	$E_{110} - E_{100}$	$E_{101} - E_{100}$	$2E_{100} + E_{011} - E_{110} - E_{101}$
type5	$E_{110} - E_{010}$	$E_{110} - E_{100}$	$E_{011} - E_{010}$	$E_{000} + E_{010} - E_{110}$
type6	$E_{111} - E_{011}$	$E_{111} - E_{101}$	$E_{111} - E_{110}$	$E_{000} + E_{101} + E_{011} - 2E_{111}$

表 2.2: 立方体中の任意の座標値 (x, y, z) がどの 4 面体に含まれているのかを判別するためのアルゴリズム.
立方体の 1 辺の長さを 1 に規格化している.

```
if (x + y < 1) {
    if (x + z > 1) {
        /* type2 */
    }
    else {
        if (x + y + z > 1) {
            /* type1 */
        }
        else {
            /* type3 */
        }
    }
}
else {
    if (x + z < 1) {
        /* type5 */
    }
    else {
        if (x + y + z < 2) {
            /* type4 */
        }
        else {
            /* type6 */
        }
    }
}
```

2.3.4 状態密度の計算方法

E から $E + dE$ の間のエネルギー値を持つ状態が、結晶の単位体積あたり何個存在するのかを表す状態密度 $D_i(E)dE$ を求めよう。 k 空間体積 $(2\pi/L)^3$ あたり 1 個の割合で $\mathbf{k}$ 状態が存在することを考慮すると、

$$\begin{aligned} D_i(E)dE &= \frac{1}{L^3} \frac{d}{dE} \left[V_i(E) / \left(\frac{2\pi}{L} \right)^3 \right] dE \\ &= \frac{1}{8\pi^3} \frac{dV_i}{dE} dE \end{aligned} \quad (2.23)$$

なる関係が得られる。ここで、 $V_i(E)$ は、4 面体 i の内部に属し、かつエネルギーが E 以下である状態が占める k 空間体積である。4 面体内部の状態に対するエネルギー値は、 k 空間の座標値に対する 1 次式で表されているので、 $V_i(E)$ および dV_i/dE を簡単に計算することができる。表 2.3 に、6 種類の型の 4 面体に対する計算結果をまとめた。なお、この表では、 k 空間内の距離の単位を立方体格子間隔で規格化して求めた $\tilde{V}_i(E)$ 、 $d\tilde{V}_i/dE$ を示していることに注意されたい。両者に因子 $\{2\pi/(aN_{\text{div}})\}^3$ をかけることで、 $V_i(E)$ 、 dV_i/dE がそれぞれ得られる。

ここで、異なるバンドを区別するため、 $D_i(E)$ にバンド番号 n に対する指標を付け加え $D_{i,n}(E)$ と表記する。すると、結晶の全体の状態密度 $D(E)$ は、 $D_{i,n}(E)$ を全 4 面体、全バンド番号に渡っ

表 2.3: 4 面体内部においてエネルギーが E 以下の状態が占める体積 $\tilde{V}_i(E)$ とその微係数 $d\tilde{V}_i/dE$ 。ここでは、立方体の 1 辺の長さを 1 に規格化している。 E_1, E_2, E_3, E_4 は、4 面体の各頂点のエネルギー値を小さい順に並べ替えたものである。また、 $E_{21} = E_2 - E_1$ 、 $E_{31} = E_3 - E_1$ 、 $E_{32} = E_3 - E_2$ 、 $E_{41} = E_4 - E_1$ 、 $E_{42} = E_4 - E_2$ 、 $E_{43} = E_4 - E_3$ とおいた。

	$\tilde{V}_i(E)$	$\frac{d\tilde{V}_i}{dE}$
$E < E_1$	0	0
$E_1 < E < E_2$	$\frac{(E - E_1)^3}{6E_{21}E_{31}E_{41}}$	$\frac{(E - E_1)^2}{2E_{21}E_{31}E_{41}}$
$E_2 < E < E_3$	$\frac{1}{6E_{31}E_{41}E_{32}E_{42}} \times [(E_{21} - E_{31} - E_{41})(E - E_1)^3 + 3(E_{31} - E_{41})(E - E_1)^2 + 3E_{21}E_{31}E_{41}(E - E_1) + E_{21}^2E_{31}E_{41}]$	$\frac{1}{2E_{31}E_{41}E_{32}E_{42}} \times [(E_{21} - E_{31} - E_{41})(E - E_1)^2 + 2(E_{31} - E_{41})(E - E_1) + E_{21}E_{31}E_{41}]$
$E_3 < E < E_4$	$\frac{1}{6} \left[1 - \frac{(E_4 - E)^3}{E_{41}E_{42}E_{43}} \right]$	$\frac{(E_4 - E)^2}{2E_{41}E_{42}E_{43}}$
$E_4 < E$	$\frac{1}{6}$	0

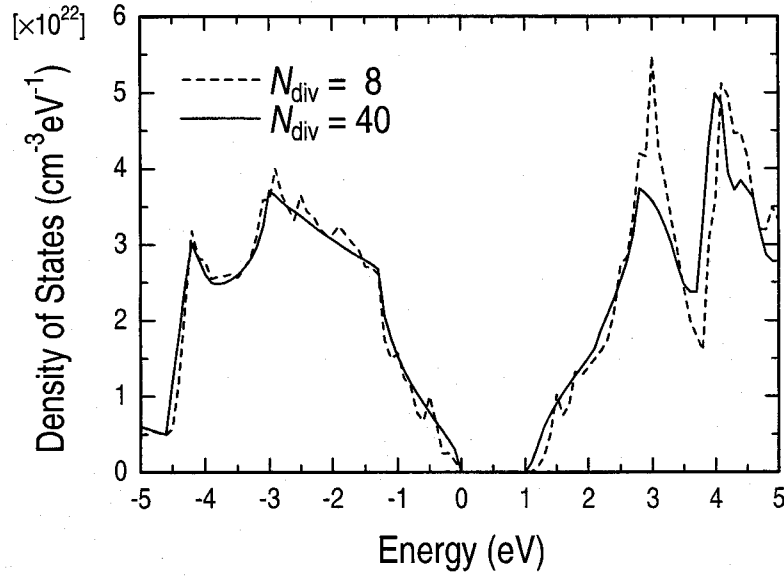


図 2.8: Si の状態密度のエネルギー依存性. エネルギーの原点は価電子帯の頂上にとった. 2 とおりの k 空間メッシュ間隔を用いたときの結果を比較している. メッシュが粗い場合には, エネルギー線形補間による誤差の影響が大きく現れる.

て足しあげること得られる.

$$\begin{aligned}
 D(E) &= 8 \sum_{i=1}^{N_t} \sum_{n=1}^{\infty} 2D_{i,n}(E) \\
 &= 8 \sum_{i=1}^{N_t} \sum_{n=1}^{\infty} 2 \frac{1}{8\pi^3} \frac{dV_{i,n}}{dE} \\
 &= \frac{16}{a^3 N_{\text{div}}^3} \sum_{i=1}^{N_t} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{d\tilde{V}_{i,n}}{dE}
 \end{aligned} \tag{2.24}$$

ここで, 因子 8 は, 第 1BZ 全体の状態を求めるためである. また, 因子 2 はスピン縮退による.

図 2.8 に, Si の状態密度の計算結果を示す. 2 種類の N_{div} を用いたときの結果を比較した. 当然, 細かく k 空間を分割した方が正確な状態密度を反映しており, 分割が粗いと, エネルギーを線形補間したことによる誤差の影響が, 状態密度にも現れることがわかる. 例えば, キャリア散乱確率は, 状態密度に依存するので, 正確な MC シミュレーションを行うためには, 十分な k 空間分割数を確保することが重要である.

2.3.5 終状態の選択方法

フルバンド MC シミュレーションにおいて, 散乱後の終状態選択に関する手続きは, もっとも手間のかかる部分である. 2.3.2 節で設定した k 空間の離散化手法を用いた場合, まず, 全 4 面体の中から, 終状態波数ベクトル $\mathbf{k}'$ を含む可能性のあるものを選び出さなければならない. 続いて, 選択された 4 面体候補の中から, 各々への散乱確率の重みに応じて, 乱数を振り, 1 つに絞り込む. そして最後に, 選択された 4 面体の内部から, エネルギー保存則を満足する $\mathbf{k}'$ を決定する. この時, もしも, 無制限にメモリを使用できるのであれば, 始状態の関数として, 散乱先となりうる

4面体候補のリストと、それらへの散乱確率をあらかじめ参照テーブル化しておけば良く、探索の高速化が可能となるであろう。ただし、 k 空間の分割数如何によっては、4面体数は膨大となるために²、制限量をはるかに超えるメモリが、すぐに必要となってしまう。

本研究では、メモリ使用を抑えつつ、高速化をはかる終状態選択法を提案する。これは、いわば E_{nk} の逆関数、すなわちエネルギー値を与えて $(n, \mathbf{k})$ を返す表をメモリ上に作成しておくことで、終状態選択の効率を目指したものであり、以下にその方式の詳細を解説する。

終状態を含む4面体の選択法

メモリの使用量を制限しながら、終状態探索を高速化するため、我々は、図 2.9 に示すように、第 1BZ を階層的に分割した。そして、第 1BZ 全体の中からいきなり終状態波数 $\mathbf{k}'$ を探索するのではなく、まず、 $\mathbf{k}'$ を含むバレー、次に立方体、4面体と順を追って領域を絞り込んでいく方式をとった。

図 2.10 に、本研究でとった第 1BZ のバレー分割法を示す。ここで、バレーとは、従来の解析バンド MC 法 [13] において、エネルギーバンド構造を表現する際用いられる概念から類推したものである。今回我々は、バレー中心座標 $\mathbf{k}_v$ として、X バレー: $2\pi/a (\pm 0.85, 0, 0)$, $2\pi/a (0, \pm 0.85, 0)$, $2\pi/a (0, 0, \pm 0.85)$, L バレー: $2\pi/a (\pm 0.5, \pm 0.5, \pm 0.5)$, Γ バレー: $2\pi/a (0, 0, 0)$ を定義した。そして、任意の波数ベクトル $\mathbf{k}$ を持った状態は、波数空間内において $\mathbf{k}$ から見て最も距離的に近い $\mathbf{k}_v$ を持つバレーに属するものとした。

2.3.1 節にて導入した散乱確率は、一般的に

$$S_m(\mathbf{k}, n; \mathbf{k}', n') = M_m(\mathbf{k}, n; \mathbf{k}', n') \delta(E_{n'\mathbf{k}'} - E_{n\mathbf{k}} - \Delta E_m(\mathbf{k}, n; \mathbf{k}', n')) \quad (2.25)$$

のように分解される。ここで、 M_m は遷移行列要素であり、また δ 関数はエネルギー保存則を表している。本アルゴリズムでは、解析バンド MC 法 [13] と同様、 M_m および ΔE_m を、始状態・終状態の波数ベクトルではなく、それらが属するバレーの組み合わせの関数として近似した。すると、

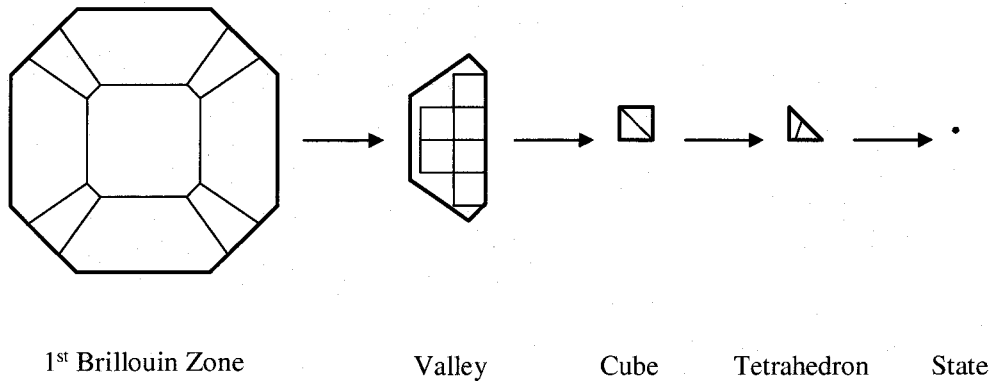


図 2.9: k 空間第 1BZ の階層的分割。終状態選択の際、いきなり第 1BZ 全体の中から終状態を探すのではなく、バレー、立方体、4面体、 $\mathbf{k}$ と段階を踏むことで、探索の効率化を図る。

²本研究で使用した $N_{\text{div}} = 40$ の場合、4面体数は 192,000 個必要である。Si の低エネルギーホールに対するバンド構造を正確に反映するため、 $N_{\text{div}} = 240$ を使用した報告もある [11]。

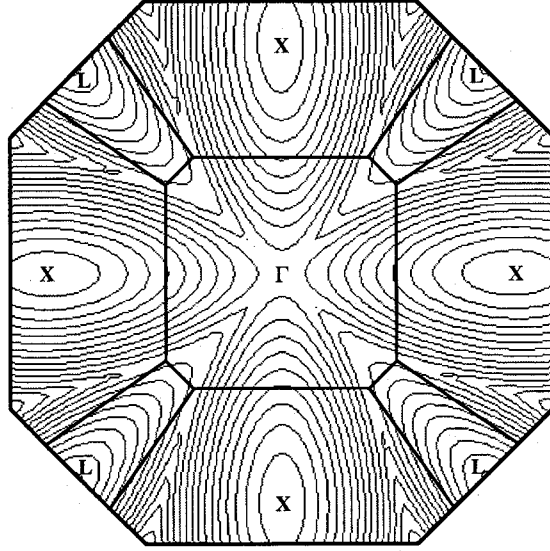


図 2.10: 第 1BZ のバレー分割. $k_z = 0$ による切断面を示した. 太線は, バレーの境界, 細線は伝導帯の中で最も低いエネルギーを持ったバンドのエネルギー等高線である. バレー中心座標として, X バレー: $(\pm 0.85, 0, 0)$, $(0, \pm 0.85, 0)$, $(0, 0, \pm 0.85)$, L バレー: $(\pm 0.5, \pm 0.5, \pm 0.5)$, Γ バレー: $(0, 0, 0)$ を定義する (ここで, k 空間座標値の単位はいずれも $2\pi/a$ である). 任意の波数ベクトル $\mathbf{k}$ は, その点から測って最も距離的に近い中心座標をもつバレーに属する.

上の散乱確率は, 終状態バレー v' の関数として, 次のように書き改められる.

$$\begin{aligned} S_m(\mathbf{k}, n; v', n') &\equiv M_m(v, n; v', n') \sum_{\mathbf{k}' \in v'} \delta(E_{n'\mathbf{k}'} - E_{n\mathbf{k}} - \Delta E_m(v, n; v', n')) \\ &= M_m(v, n; v', n') D_{n'v'}(E') \end{aligned} \quad (2.26)$$

ここで, $D_{n'v'}(E')$ は, バレー v' に属し, バンド番号 n' と終状態エネルギー $E' = E_{n\mathbf{k}} + \Delta E_m(v, n; v', n')$ をもった状態の密度である. 終状態選択手続きでは, まず式 (2.26) の重みを考慮しつつ, 全バレー, 全バンドの中から 1 組の (v', n') を, 乱数を振ってランダムに選択する. なお, $D_{n'v'}(E')$ の値については, エネルギー軸を適当に離散化し, (n, v, E) の関数として参照テーブルを作ることによって, 計算量を省くことができる. 今回考えたバレーの数は 5 個, またバンドの数も高々 5 本なので, M_m , Δ_m に関しても, メモリ量を抑えつつ, テーブル化が可能である.

終状態バレー v' が定まると, 次は, 終状態立方体 c' を選択する作業に移る. この時点ではもうすでに, 終状態エネルギー E' が定まっているので, v' に含まれ, かつ内部にエネルギー E' を有する状態を含む立方体をリストアップし, そのなかから 1 つを選び出せばよい. 各立方体に含まれるエネルギー E' の状態密度 $D_{n'c'}(E')$ を重みとして, 乱数を振って 1 つの立方体を選択することとなる. この際, 例によって, 高速化のためにあらかじめ $D_{n'c'}(E')$ をテーブル化しておくわけだが, ここで, 我々が作成したデータ構造を図 2.11 に紹介しよう. エネルギー軸を離散化し, 線形リスト構造を用いて, 各エネルギー値を持つ立方体に関する情報をまとめた. 線形リストの各ノードは, 次ノードへのポイントに加え, 立方体番号, エネルギー範囲 $[E, E + \Delta E]$ の状態密度を保持する. このデータ構造は, 各バレーおよびバンドごとに作成する. これにより, 候補のリストアップと同時に, それぞれの選択の際必要となる重みが瞬時に得られる.

立方体の次は, 4 面体の選択である. c' に含まれる 4 面体の中から, 各々の内部のエネルギー E' の状態密度 $D_{n'v'}(E')$ を重みとし, ランダムに終状態 4 面体 v' を選択する. なお, 立方体に含まれ

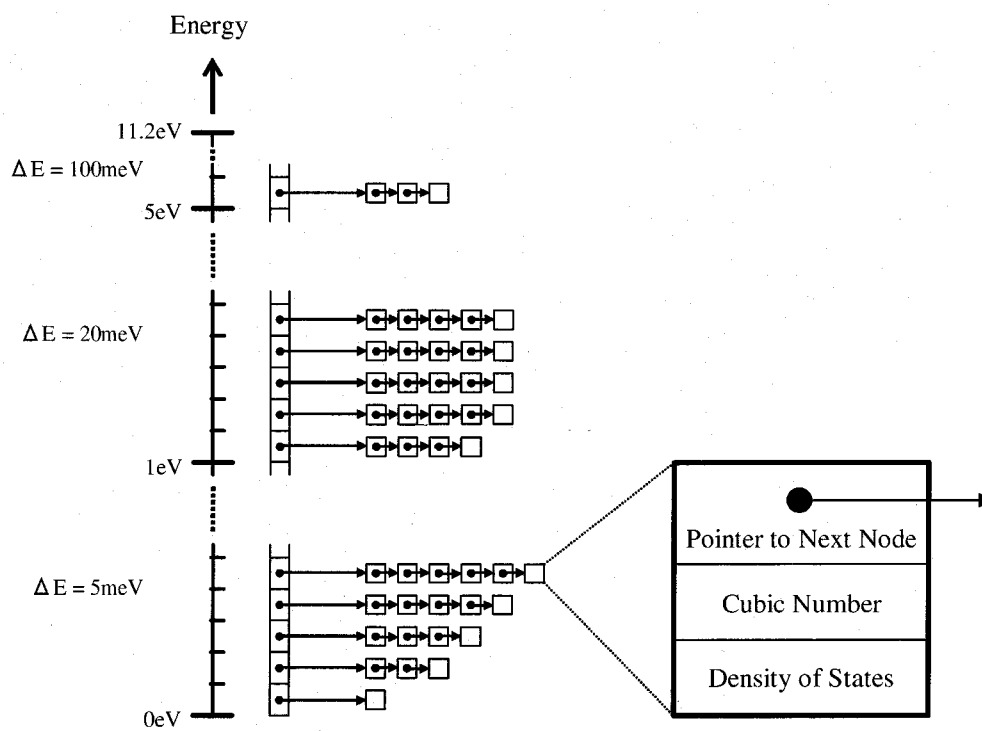


図 2.11: 候補 4 面体を高速に探索するための状態密度テーブル. まず, エネルギー軸を離散化する. 離散化間隔 ΔE は, 低エネルギー領域ほど細かく取った. エネルギー範囲 $[E, E + \Delta E]$ のセルには, そのエネルギー状態を含む立方体を集めた線形リストへのポインタを格納する. 線形リストの各ノードは, 次ノードへのポインタに加え, 立方体番号と, その内部に含まれるエネルギー範囲 $[E, E + \Delta E]$ における状態密度を保持する.

る4面体の数は、高々6個であるので、散乱手続きの度ごとに、状態密度を計算しても時間はかからない。したがって、膨大な数存在する各4面体に対する状態密度テーブルの作成は必要とならない。

本研究では、以上の方法により、終状態4面体を決定した。なお、ここで紹介した階層化の手法は、あくまでも1例であって、使用できるメモリ空間に十分な余裕がある場合には、第1BZをもっと細かなバレーに区切るなど、近似度の向上を図ることができる。また、探索の途中段階において立方体という階層を導入したが、これは、図2.11の参照テーブルの大きさを抑えるためであり、もしも、メモリに余裕がある場合には、わざわざ立方体を導入しなくとも、直接4面体に対する状態密度テーブルを作成しても良い。

4面体内部から終状態波数ベクトル $\mathbf{k}'$ を選択する方法

4面体内部から、エネルギー E を有する終状態 $\mathbf{k}'$ を選択する方法について説明する。4面体内部の任意の $\mathbf{k}$ に対するエネルギー値は、4つの頂点のエネルギーを線形補間することで計算される。したがって、等エネルギー面は、図2.12に示すように、3角形または4角形の平面となる。この面上において、一様な確率でランダムに $\mathbf{k}$ を選択する必要があるのだが、ここで、図2.13に示すような $\triangle ABC$ 中の任意の点 R を選択するアルゴリズムを考えよう。もし、等エネルギー面が4角形の場合は、その4角形を2つの3角形に分割し、それぞれに含まれる状態密度の重みを考慮して1つの3角形を選択した後に、このアルゴリズムを用いるとよい。まず、 r_1, r_2 を $[0, 1]$ の範囲にある2つの独立な一様乱数として、

$$\overrightarrow{OR} = \overrightarrow{OA} + r_1 \overrightarrow{AB} + r_2 \overrightarrow{AC} \quad (2.27)$$

より、暫定的な点 R の位置ベクトルを決定する。ここで、暫定的と断ったのは、(2.27) をそのまま用いた場合、 $\triangle ABC$ 中ではなく平行4辺形 $ABA'C$ 内の範囲に点が散らばってしまうためである。点 R が $\triangle ABC$ からはみ出すのは、 $r_1 + r_2 > 1$ となる場合である。そこで、もし、 $r_1 + r_2 > 1$ ならば、 r_1 を $1 - r_1$ に、さらに r_2 を $1 - r_2$ と置きなおすことで、点 R は、点 D (辺 BC の中点) に対する対称点 R' に変換され、 $\triangle ABC$ 中に入ることになる。

2.4 シミュレーション実行速度の評価

フルバンドMC法に対し、2.3.5節で施した高速化の効果を確認するため、実際にMCデバイスシミュレーションを行って、要するCPU時間を測定した。ここでは、以下に示す3つのシミュレーション手法を比較する。

i) 解析バンドMC法 ... エネルギーバンド構造を解析式で近似表現する、従来から一般的に用いられてきたMC法である。今回は、Jacoboniら[13]によるモデルを用いた。波数ベクトル対エネルギー値の関係が、解析式で与えられるため、相互の対応関係を高速に計算することができる。なお、モデルの詳細に関しては、本論文の第5章においても解説を行う。

ii) フルバンドMC法(状態密度テーブルなし) ... 散乱後の終状態選択に際し、全4面体の中から散乱候補をリストアップする作業、およびそれぞれの候補に対する散乱重み(終状態エネルギーに対する状態密度)の計算を、あらかじめテーブル化せず、散乱手続きのたびごとに行う。大阪大

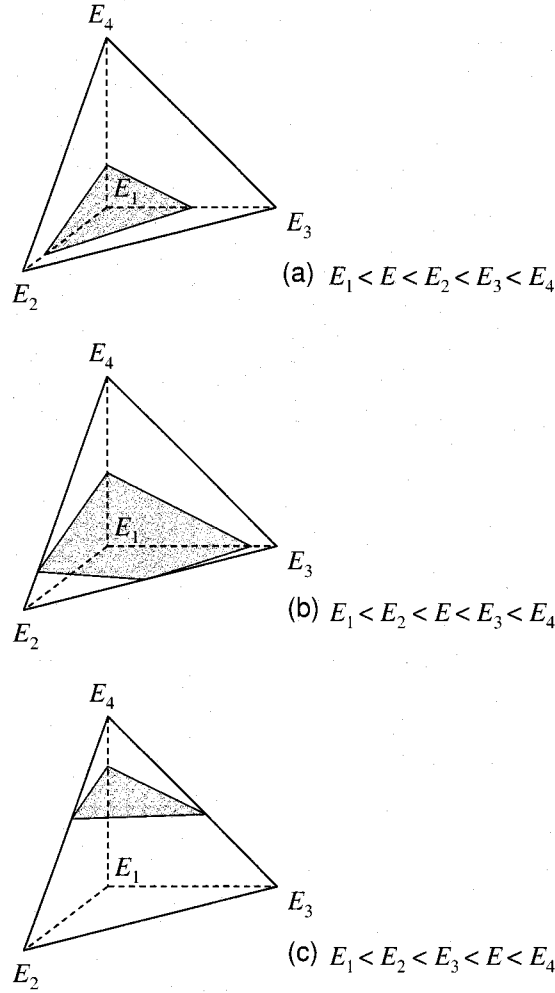


図 2.12: 4 面体内部でエネルギー E を持った状態が示す等エネルギー面. 本研究では, エネルギー値を線形補間しているので, 等エネルギー面は平面となる. 4 頂点のエネルギーをそれぞれ E_1, E_2, E_3, E_4 とおき, それらの大小関係は $E_1 < E_2 < E_3 < E_4$ であるとする. E の大きさによって (a), (b), (c), 3 とおりの場合に分類される. $E < E_1$ または $E > E_4$ の場合は, 当然 4 面体内部に等エネルギー面が存在しない.

学のグループが, 1994 年に報告したフルバンド MC シミュレータ [4] では, この方式が用いられていた.

iii) フルバンド MC 法 (状態密度テーブルあり) ... 2.3.5 節で説明した終状態選択法をフルバンド MC シミュレータに組み込んだ.

我々は, これらのアルゴリズムを, Si-MOSFET のための MC デバイスシミュレータ [19] に組み込み, キャリア輸送のシミュレーションを行った. 使用した粒子数は, 電子 320,000 個, ホール 160,000 個である. ただし, ホールに関しては, 全て解析バンド MC モデルで扱い [13], 電子についてのみ上で挙げた 3 種類のアロリズムを用意した. フルバンド MC において, 考慮した伝導帯は低エネルギー側から 4 本まで, また k 空間分割数 N_{div} は 40 とした.

図 2.14 に, 計算結果を示す. 終状態の選択が, 如何に MC シミュレーションの実行速度に影響

を及ぼすのが良く分かる．今回，状態密度テーブルを導入したことにより，フルバンド MC 法が，従来の解析バンド MC 法と同程度の計算速度で実行可能となった．

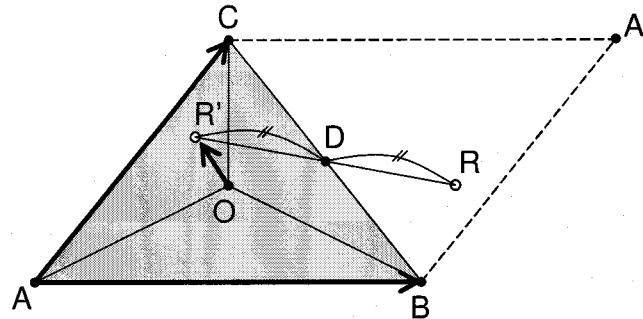


図 2.13: $\triangle ABC$ 内部から，一様な確率でランダムに 1 つの点を選択する方法．まず，一様乱数を 2 個用いて，平行 4 辺形 $ABA'C$ の内部からランダムに点 R を選択する．この時，図に示すように，もしも R が $\triangle ABC$ から外れた場合には， R を点 D (辺 BC の中点) に対する対称点 R' に変換する．

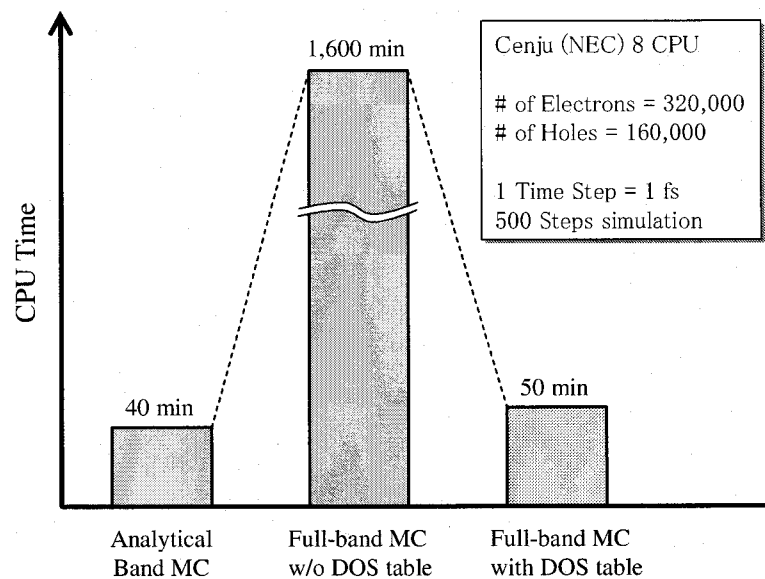


図 2.14: MC シミュレーションに要する典型的な計算時間の比較．電子 320,000，ホール 160,000 個に対する MC シミュレーションを 1 タイムステップを 1 fs として 500 fs 間実行し，CPU 時間を調べた．使用マシンは，NEC 製分散メモリ型並列計算機 Cenju-3 (8CPU 構成) である．解析式により表現されたバンドモデルを使用した MC 法，状態密度テーブルを用いない，あるいは用いたフルバンド MC 法，の三者につき比較を行っている．

2.5 まとめ

フルバンドMCシミュレータにおいて、最も計算量を必要とする散乱後の終状態選択手続き部分を高速化するアルゴリズムを提案した。エネルギー値を与えて波数ベクトルを返す表を、あらかじめメモリ上に参照テーブルとして作成しておくことで、両者の対応関係を高速に検索することが可能となった。さらに、 k 空間を、バレー、立方体、4面体と階層的に分割することで、必要となるメモリ量の節約を図った。この高速化は、等間隔正方格子にて k 空間を分割したフルバンドMCシミュレータに適用したものであり、特殊なメッシュ形成技術が不要であることも特徴の一つである。実際に、MCデバイスシミュレーションを実行し、計算時間を評価したところ、従来の解析バンドMC法と同程度の速度で、フルバンドMCシミュレーションが実行可能であることが分かった。

参考文献

- [1] H. Shichijo and K. Hess, Phys. Rev. B **23**, 4197 (1981).
- [2] M.V. Fischetti and S.E. Laux, Phys. Rev. B **38**, 9721 (1988).
- [3] *Monte Carlo Device Simulation: Full Band and Beyond*, edited by K. Hess, Kluwer Academic, Boston, 1991.
- [4] T. Kunikiyo, M. Takenaka, Y. Kamakura, M. Yamaji, H. Mizuno, M. Morifuji, K. Taniguchi, and C. Hamaguchi, J. Appl. Phys. **75**, 297 (1994).
- [5] M.V. Fischetti, S.E. Laux, and E. Crabbé, J. Appl. Phys. **78**, 1058 (1995).
- [6] J.D. Bude, M. Mastrapasqua, IEEE Electron Device Letters **16**, 439 (1995).
- [7] J. Bude, T. Iizuka, and Y. Kamakura, Tech. Dig. IEDM, p. 865, San Francisco, 1996.
- [8] Y. Kamakura, A. Ishida, and K. Taniguchi, Physica B **272**, 532 (1999).
- [9] M.L. Cohen and T.K. Bergstresser, Phys. Rev. **141**, 789 (1966).
- [10] A. Abramo, L. Baudry, R. Brunetti, R. Castagne, M. Charef, F. Dessenne, P. Dollfus, R. Dutton, W.L. Engl, R. Fauquembergue, C. Fiegna, M.V. Fischetti, S. Galdin, N. Goldman, M. Hackel, C. Hamaguchi, K. Hess, K. Hennacy, P. Hesto, J.M. Higman, T. Iizuka, C. Jungemann, Y. Kamakura, H. Kosina, T. Kunikiyo, S.E. Laux, H. Lin, C. Maziar, H. Mizuno, H.J. Peifer, S. Ramaswamy, N. Sano, P.G. Scrobohaci, S. Selberherr, M. Takenaka, T.-W. Tang, K. Taniguchi, J.L. Thobel, R. Thoma, K. Tomizawa, M. Tomizawa, T. Vogelsang, S.-L. Wang, X. Wang, C.-S. Yao, P.D. Yoder, and A. Yoshii, IEEE Trans. Electron Devices **ED-41**, 1646 (1994).
- [11] S. Jallepalli, M. Rashed, W.-K. Shih, C. M. Maziar, and A. F. Tasch, Jr., J. Appl. Phys. **81**, 2250 (1997).
- [12] R. Oberhuber, G. Zandler, and P. Vogl, Phys. Rev. B **58**, 9941 (1998).
- [13] C. Jacoboni and L. Reggiani, Rev. Mod. Phys. **55**, 645 (1983).
- [14] J. Bude and R.K. Smith, Semicond. Sci. Technol. **9**, 840 (1994).
- [15] C. Jungemann, S. Yamaguchi, and H. Goto, Proc. 26th European Solid State Device Research Conference, p. 821, Bologna, 1996.
- [16] 鎌倉 良成, 飯塚 貴弘, 山本 佳史, 田中 克彦, 松本 比呂志, 第 43 回応用物理学関係連合講演会, 27a-G-3, 1996.

- [17] H. Mizuno, K. Taniguchi, and C. Hamaguchi, Phys. Rev. B **48**, 1512 (1993).
- [18] O. Jepson and O. K. Anderson, Solid State Commun. **9**, 1763 (1971).
- [19] K. Shigeta, K. Tanaka, T. Iizuka, H. Kato, and H. Matsumoto, in *Simulation of Semiconductor Devices and Processes, Vol. 6*, edited by H. Ryssel and P. Pichler, p. 384, Springer-Verlag, Wien, New York, 1995.

第3章 ホットホール散乱確率の精度検証

3.1 はじめに

Si-MOSFET 動作の解析には、ホットエレクトロンだけでなく、ホットホールの挙動を正確に理解することが重要である。たとえば、 n MOSFET と比べ電流駆動能力の劣る p MOSFET の性能が、速度オーバーシュート効果によりどれほど改善するかについては、大きな関心が持たれている [1]。また、インパクトイオン化フィードバック効果は、チャネルでのホットキャリア発生を増進するので、ゲート電流増加の原因となるし、またこれを逆手にとることで低電圧動作のフラッシュメモリを実現するアイデアなども報告されている [2]。さらに、ストレス誘起リーク電流や絶縁破壊などのゲート酸化膜劣化には、アノードホールインジェクション過程が深く関与しているとの指摘もある [3, 4]。これら効果には、すべて高エネルギーのホールが重要な役割を果たしており、正確な予測を行うためにも、高精度のホール散乱モデルを組み込んだフルバンド MC シミュレータの開発が強く望まれている。

フルバンド MC シミュレーション用の電子散乱モデルは、これまで広く研究された結果、現在では散乱確率の大きさがほぼ固まってきた [5, 6]。さまざまな電子輸送特性の測定 [7] や、エネルギーバンド、格子振動に対する精密な理論計算 [8-10] を通じて、検証が加えられ、その精度が確認されてきた。しかしながら、一方のホットホール用散乱モデルの開発はというと、こちらは未だ不十分な状況にあると言わざるを得ない。図 3.1 は、ホール-フォノン散乱確率とインパクトイオン化率についてこれまで報告 [11-15] された値の比較であるが、各々の間に大きな開きが見てとれる。この状況の主な原因は、ホットホール輸送に関する実験の少なさにある。すなわち、利用できる測定値 (ホールドリフト速度とイオン化係数の電界依存性) との比較のみでは、ホール散乱確率の値を狭い範囲にまで絞り込むことが難しいのである。

1993 年 Cartier らは、それ以前は文献間で大きな開きのあった電子散乱確率の値を検証するため、イオン化係数のほか、軟 X 線による光電子分光実験、およびインパクトイオン化量子生成効率の測定値を利用した [7]。ここで、イオン化係数は、バンドギャップエネルギー近傍の非弾性フォノン散乱確率に強く依存し、一方、後者の 2 つ実験値は、イオン化確率とフォノン散乱確率の比にほぼ比例する。このような依存性の違いが、2 種類の散乱確率 (フォノン散乱、インパクトイオン化) を独立に決定する上で大変有効であった。ただ、残念なことに、ホールの真空放出や、ホールに対する量子生成効率測定実験は困難である。

本研究では、電子に対する量子生成効率の 1 を超える部分を用いて、ホール散乱確率に新たな検証を加えることを試みた [16]。この実験結果には、電子のイオン化後に生成されたホールが、再びインパクトイオン化を起こす割合についての情報が含まれる。それは、ドリフト速度やイオン化係数とは異なる依存性を散乱確率に対して示すので、新たな検証用データとしての利用が期待できると考えた。本章は、以下のように構成される。まず、3.2 節にてフルバンド MC 用の散乱確率モデルを整理する。次いで、ホール散乱確率に対する従来の検証方法の限界を 3.3 節にて明らかにし、3.4 節において、1 以上の量子生成効率を用いた新しい検証法とその結果について議論する。そして最後に、3.5 節でまとめとする。

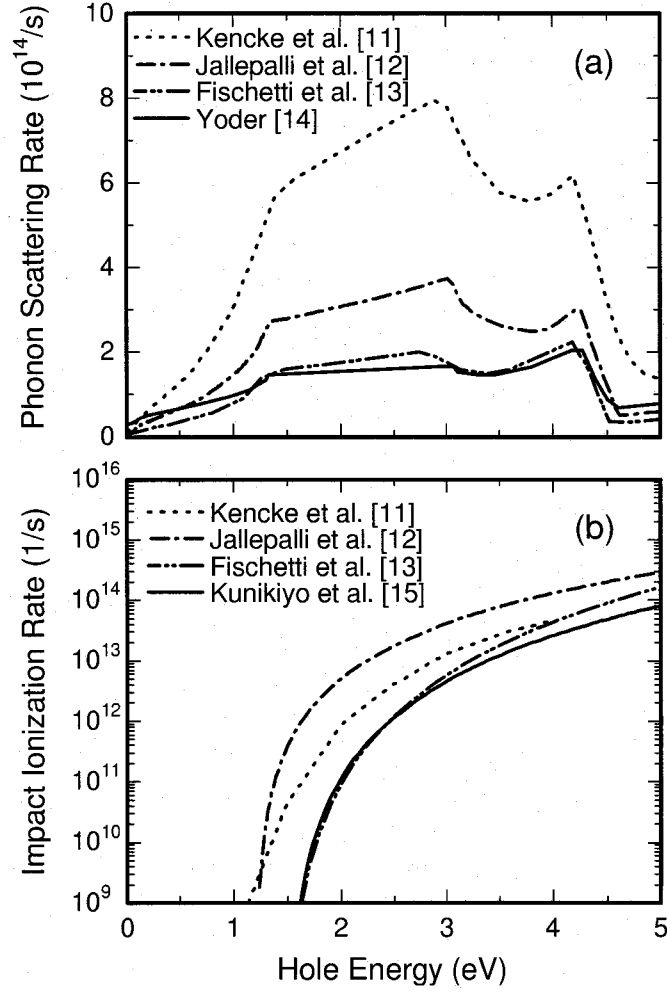


図 3.1: これまでに報告された Si 中のホール散乱確率. 格子温度は 300 K とした. (a) 全フォノン散乱確率と (b) ホールによるインパクトイオン化確率をホールエネルギーの関数としてプロットした.

3.2 シミュレーションモデル

本研究では, Si 中の電子とホールの輸送をフルバンド MC 法 [10] でシミュレーションした. 考慮した散乱過程は, ホットキャリア輸送に特に影響の大きいフォノン散乱とインパクトイオン化である. これらの散乱確率は, すべてバンド計算 [17] から得られた状態密度等の情報をもとに計算する. 以下では, モデルの詳細について説明する.

3.2.1 フォノン散乱モデル

本研究では, フォノン散乱確率 $1/\tau_{\text{ph},\eta}^{\pm}(n, \mathbf{k})$ を次式によって与えた.

$$\frac{1}{\tau_{\text{ph},\eta}^{\pm}(n, \mathbf{k})} = \sum_{n'} \sum_{\mathbf{q} \in 1^{\text{st}} \text{BZ}} \frac{\pi}{\rho \Omega \omega_{\eta, \mathbf{q}}} D_{\eta}(n, \mathbf{k}, n', \mathbf{q})$$

$$\times \left(N_{\eta, \mathbf{q}} + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \times \delta(E_{n', \mathbf{k} + \mathbf{q}} - E_{n, \mathbf{k}} \mp \hbar\omega_{\eta, \mathbf{q}}) \quad (3.1)$$

ここで、複号は上がフォノン吸収、下が放出に相当する。 n と $\mathbf{k}$ は、それぞれ始状態ホールのバンド番号と波数ベクトル、 n' は終状態ホールのバンド番号、 ρ と Ω は結晶の密度と体積、 η , $\mathbf{q}$, $\omega_{\eta, \mathbf{q}}$, $N_{\eta, \mathbf{q}}$ はそれぞれフォノンの分枝、波数ベクトル、振動数、占有数、 $D_{\eta}(n, \mathbf{k}, n', \mathbf{q})$ は変形ポテンシャル、 $E_{n, \mathbf{k}}$ はホールのエネルギーである。音響フォノンの分散関係は、文献 [18] の近似式を利用した。

$$\hbar\omega_{\eta, \mathbf{q}} = \begin{cases} \hbar\omega_{\eta, \max} \left[1 - \cos\left(\frac{qa}{4}\right) \right]^{1/2}, & q \leq 2\pi/a \\ \hbar\omega_{\eta, \max}, & q > 2\pi/a \end{cases} \quad (3.2)$$

ここで、 $\hbar\omega_{\text{LA}, \max} = 22.1$ meV と $\hbar\omega_{\text{TA}, \max} = 44.3$ meV はそれぞれ、縦波および横波音響フォノンに対するパラメータである。なお、光学フォノンについては、分散を無視し、一定のエネルギー値 $\hbar\omega_{\text{op}} = 62.0$ meV を仮定した [18]。

変形ポテンシャルについては、音響フォノンの場合はフォノン波数 q に比例、一方、光学フォノンについては、定数と仮定した。我々は、電子に関するフルバンド MC シミュレーションモデル [10] を参考に、変形ポテンシャルの自乗を始状態ホールのエネルギー $E_{n, \mathbf{k}}$ の線形関数で表す以下の近似式を導入した。

$$D_{\text{TA}}(n, \mathbf{k}, n', \mathbf{q}) = D_{\text{LA}}(n, \mathbf{k}, n', \mathbf{q}) = (A_{\text{ac}} + B_{\text{ac}} E_{n, \mathbf{k}})^{1/2} q \quad (3.3)$$

$$D_{\text{op}}(n, \mathbf{k}, n', \mathbf{q}) = (A_{\text{op}} + B_{\text{op}} E_{n, \mathbf{k}})^{1/2} \quad (3.4)$$

ここで、 A_{ac} , B_{ac} , A_{op} , B_{op} は、フィッティングパラメータである。

3.2.2 インパクトイオン化モデル

インパクトイオン化率は、変形した Keldysh の式 [19]:

$$\frac{1}{\tau_{\text{ii}}(n, \mathbf{k})} = P(E_{n, \mathbf{k}} - E_{\text{th}})^{\gamma} \quad (3.5)$$

でエネルギーのみの関数として表した。ここで、 P は定数、 E_{th} はイオン化しきい値エネルギーである。指数部に $\gamma = 2$ を用いるとオリジナルの Keldysh の式 [20] に帰着するが、これは、直接遷移型の放物線型バンド構造を仮定した特別な場合に限られる。現実的なバンド構造を考慮してイオン化率を計算した場合には、 γ の値は、一般的に 2 以上の値を示す [19]。

MC シミュレーション中では、イオン化後の 3 粒子の終状態を決めるため、Kane の random- $\mathbf{k}$ 近似 (RKA) [21] を利用した。この手法は、初期状態、終状態の粒子状態に関し、エネルギー保存則を考慮するが、運動量保存則は無視する。終状態についての分布関数は、伝導帯と価電子帯の状態密度を用いて表され、シミュレータにおいて終状態選択に要するメモリと計算時間を大幅に節約することができる。

ここで、電子によって引き起こされるインパクトイオン化を例にとり、2 次粒子 (電子 2 個、ホール 1 個) の状態決定手続きを解説する。インパクトイオン化を起こす初期電子のエネルギーを E 、2 次電子のエネルギーを E_{e1} , E_{e2} 、2 次ホールのエネルギーを E_h とする。ただし、電子、ホールのエネルギーは、それぞれ伝導帯の底、価電子帯の頂上から測り、共に正の値で表すこととする。

RKAによると、 E が与えられたとき、 E_h に対する条件付き確率分布は、

$$S_{eh}(E_h|E) = \frac{\rho_v(E_h) \int \rho_c(E - E_{e1} - E_h - E_g) \rho_c(E_{e1}) dE_{e1}}{\int \rho_v(E_h) \int \rho_c(E - E_{e1} - E_h - E_g) \rho_c(E_{e1}) dE_{e1} dE_h} \quad (3.6)$$

と表される。ここで、 E_g はエネルギーギャップ、 ρ_c と ρ_v はそれぞれ、伝導帯と価電子帯の状態密度である。この分布に基づき、まず E_h の値を乱数を振って選択する。続いて、 E_{e1} を次の条件付き確率分布

$$S_{ehe}(E_{e1}|E, E_h) = \frac{\rho_c(E - E_{e1} - E_h - E_g) \rho_c(E_{e1})}{\int \rho_c(E - E_{e1} - E_h - E_g) \rho_c(E_{e1}) dE_{e1}} \quad (3.7)$$

をもとに選択する。残る E_{e2} は、エネルギー保存則:

$$E_{e2} = E - E_{e1} - E_h - E_g \quad (3.8)$$

から決定すればよい。最後に、エネルギーが決まった各粒子の波数ベクトルとバンド番号を、等エネルギー面上から無作為に選択する。

図 3.2 は、RKA より求めた 2 次粒子のエネルギー分布である。参考のため、現実的バンド構造から、RKA を用いず運動量保存則をも考慮して計算した結果 [19] も示した。実際には、インパクトイオン化事象は、エネルギーのみの関数ではなく、 $\mathbf{k}$ や n に依存する。しかしながら、図 3.2 によれば、2 次粒子エネルギー分布は、1 次電子の $\mathbf{k}$ 、 n に対してさほど強い依存性は持っておらず、RKA の結果とも近い値を示している。さらに、実際に MC 法でホットキャリア輸送をシミュレーションすると、フォノン散乱が頻繁に起こってキャリア分布が $\mathbf{k}$ 空間内の全方向に広がるため、インパクトイオン化の異方性の影響が輸送特性にあまり現れないことが知られている [10, 22]。これらの理由により、エネルギーのみの関数として表した上記イオン化モデルが、本研究のシミュレーション結果に対し重大な誤差を与えないと考えられる。

3.2.3 フルバンド MC シミュレーションの方法

フルバンド MC シミュレータに取り入れるエネルギー分散関係は、経験的局所擬ポテンシャル法 [17] を用いて計算した。波動関数の展開に用いる平面波数は 113 本とし、擬ポテンシャル形状因子は文献 [19] の値を用いた。第 2 章で定義した $\mathbf{k}$ 空間分割法により ($N_{\text{div}} = 40$)、エネルギー値のテーブル化を行った。

散乱後の終状態選択であるが、光学フォノン散乱とインパクトイオン化については、終状態エネルギーの確定後、そのエネルギー値を持つ $\mathbf{k}$ 、 n を等エネルギー面上から等方的に選択する手続きとなる。これには、第 2 章で導入した状態密度テーブル法を利用することが、高速であり、なおかつ精度上も問題がない。一方、音響フォノン散乱については、フォノンエネルギーや変形ポテンシャルがフォノン波数 q に依存するモデルを用いたため、厳密に言うと、バレー分割が粗い場合の誤差が懸念される。そこで、本研究では、より忠実にモデル式を反映するため、音響フォノン散乱についてのみ、棄却法による終状態選択アルゴリズム [23] を採用した。なお、この手法の詳細は、付録 A に解説している。

3.3 ホール散乱確率の精度に関する従来の検証法

本研究では、2 つのホール散乱確率モデルを比較した。モデル 1 は、文献 [12] の結果をもとにした。フォノンの変形ポテンシャル、および RKA のための行列要素の値 [21] を、ドリフト速度と

イオン化係数の実験値 [24, 25] を再現するよう、調整して決定した。なお、このモデルでは、音響フォノン散乱を MC シミュレーション中で弾性散乱と扱っている。モデル 2 では、文献 [15] で報告されたインパクトイオン化確率の第一原理的計算結果が正しいものと仮定して固定した。一方、フォノン変形ポテンシャルはフィッティングパラメータとし、ドリフト速度とイオン化係数の実験値 [24, 25] を再現するよう調整した [26]。これら 2 つのモデルのホールフォノン散乱確率を図 3.3 に示す。また、インパクトイオン化率は、図 3.1 (b) に示している。表 3.1 には、パラメータ値をまとめた。

これら 2 つのモデルは、散乱確率が大きく異なるにもかかわらず、利用できる実験結果を良く再現する。図 3.4 は、ドリフト速度の電界依存性であるが、モデル 1 とモデル 2 は、共に実験値と良い一致を示している。これは、低電界下のキャリア移動度を主に支配する音響フォノン散乱確率の大きさが、図 3.3 のように、両者でほぼ等しいことによるものと考えられる。また、図 3.5 で示すイオン化係数においても、2 つのモデルは良く実験値を再現していることが分かる。モデル 2 では、光学フォノン確率がモデル 1 と比べて低く、これは、同じ電界下でもキャリアエネルギーが容

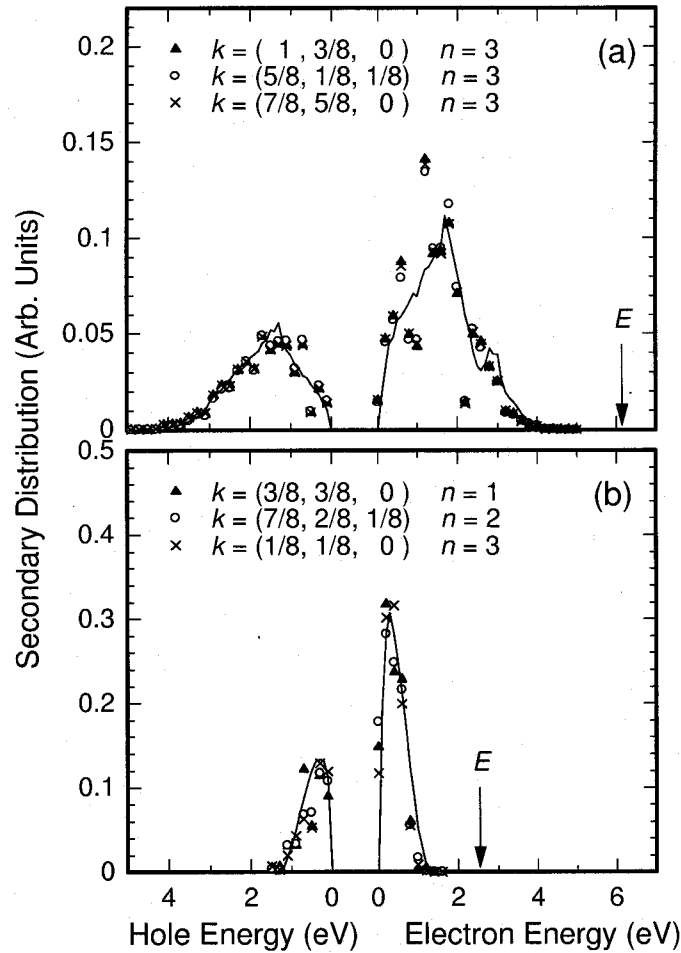


図 3.2: 電子起因のインパクトイオン化で生成された 2 次粒子のエネルギー分布。線は、本研究で用いた random- $\mathbf{k}$ 近似の計算結果である。初期電子エネルギーが $E = 6.1$ eV (a) と $E = 2.6$ eV (b) の場合を比較した。印は、同じ分布を第一原理的に計算した結果であり、エネルギー E を持ちながら、 $\mathbf{k}$ (単位は $2\pi/a$) と n (伝導帯の底から 1, 2, 3 と順番をつけた) が異なる 3 つの初期電子状態の場合をプロットしている。

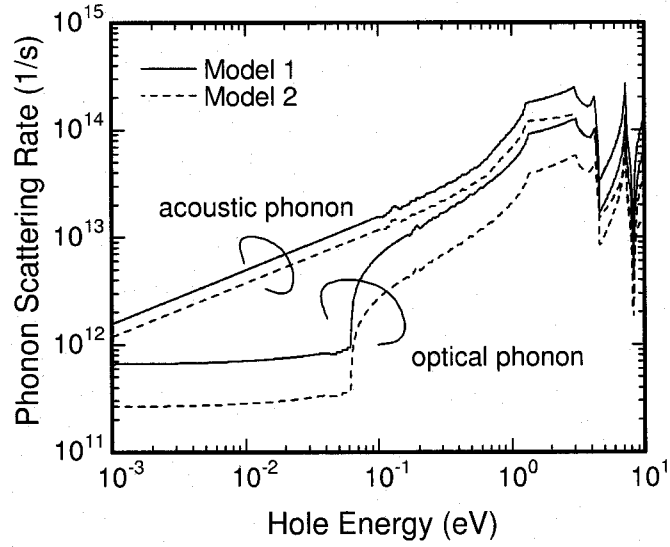


図 3.3: 室温における Si 中のフォノン散乱確率のホールエネルギー依存性. モデル 1 とモデル 2 の音響フォノンおよび光学フォノン散乱確率を比較した.

表 3.1: フォノン変形ポテンシャルとインパクトイオン化確率のためのパラメータ.

	Electrons [a]	Holes (Model 1)	Holes (Model 2)	Units
A_{ac}	0.17	5.28 [b]	4.0	eV^2
B_{ac}	1.5	0 [b]	-0.35	eV
A_{op}	1.1×10^{16}	2.5×10^{17} [b]	1.0×10^{17}	$\text{eV}^2 \text{cm}^{-2}$
B_{op}	1.1×10^{17}	0 [b]	5.0×10^{15}	eVcm^{-2}
P	1.0×10^{11}	6.0×10^{12} [c]	1.14×10^{12} [d]	$\text{eV}^{1/\gamma} \text{s}^{-1}$
E_{th}	1.1	1.2 [c]	1.49 [d]	eV
γ	4.6	2.6 [c]	3.4 [d]	-

[a] From Ref. [10].

[b] From Ref. [12].

[c] Parameters are extracted from Ref. [12].

[d] From Ref. [15].

易に上がりやすいことを意味する. しかし, 同時にモデル 2 ではインパクトイオン化確率も小さく設定されており, 同じエネルギー値でもイオン化が起こりにくくなっている. これら 2 つの効果が互いにキャンセルすることで, モデル 1 とモデル 2 は, 同程度のイオン化係数を示すことと考えられる. このように, 2 つのモデルは, 従来の検証法においては, ともに「正しい」散乱確率であるといえる.

一方, 実験値との直接比較ができない他のシミュレーション結果に関しては, 両モデルで大きな違いが現れる. 図 3.6 は, 一定電界下において定常状態にあるホールのエネルギー分布である. 分布の高エネルギーテイルは, フォノン散乱確率の大きさに強く依存するため, 両者に大きな差が現れている. 図 3.7 は, ホールのドリフト速度のオーバーシュート特性を調べた結果である. 最初熱

的平衡状態にあるホール集団に、突然 200 kV/cm の電界を印加し、その後の平均速度の応答を調べた。非定常状態における速度オーバーシュート量がモデルにより異なっていることが分かる。しかし、十分な時間が経過し、定常状態に落ち着いた時のドリフト速度は、図 3.4 でも見たように、ほぼ同じ値を示す。このように、実験による測定が難しく、本来 MC シミュレーションの威力が発揮されるべき物理量が不確定であることは、大きな問題である。

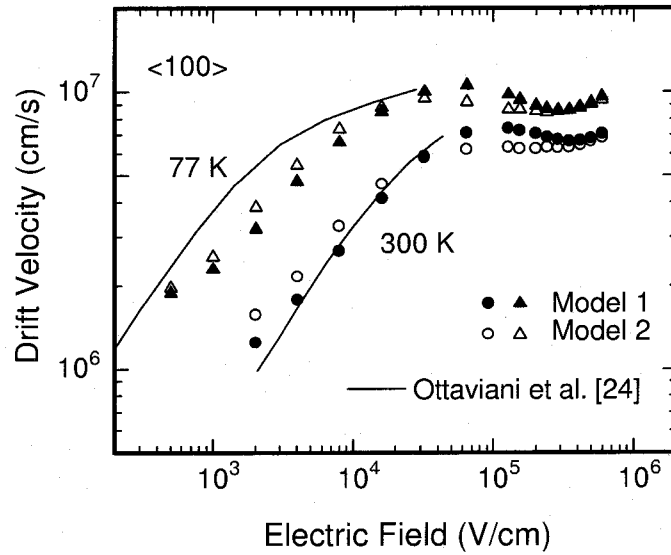


図 3.4: 室温におけるホールドリフト速度の電界依存性。シミュレーションと実験結果 [24] を比較している。電界は $\langle 100 \rangle$ 方向に印加した。

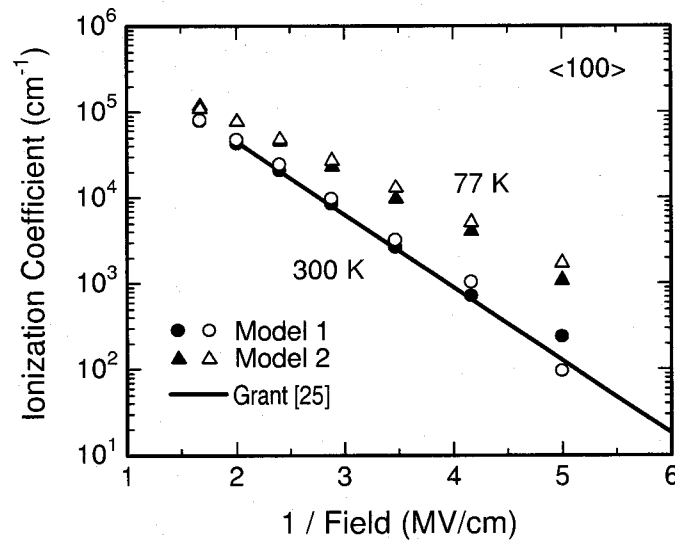


図 3.5: 室温におけるイオン化係数の電界依存性。シミュレーションと実験結果 [25] を比較している。電界は $\langle 100 \rangle$ 方向に印加した。

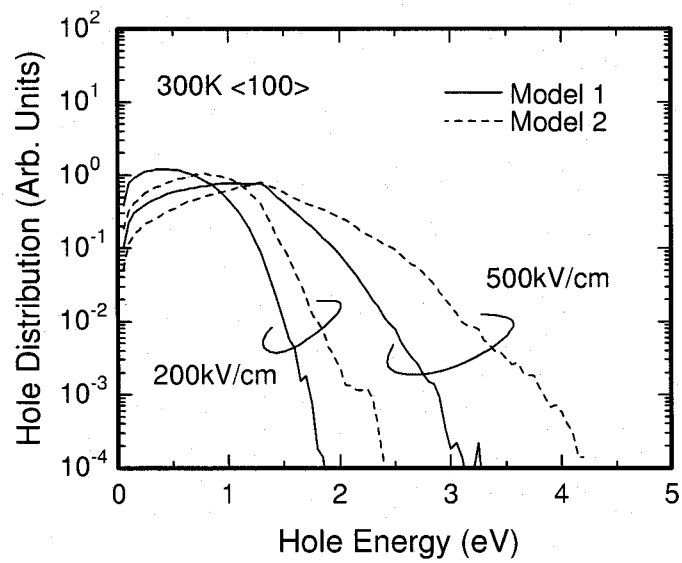


図 3.6: 一様電界の下での定常状態におけるホールエネルギー分布の計算結果. 温度は 300 K, 電界印加方向は $\langle 100 \rangle$ とした.

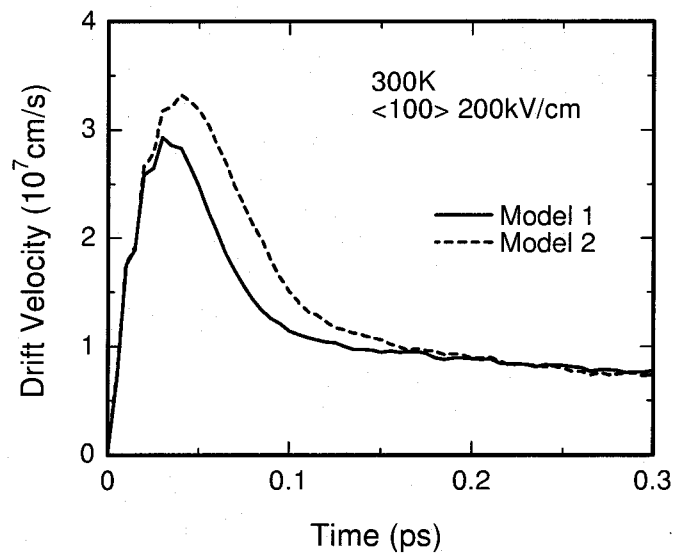


図 3.7: 200 kV/cm の電界を突然印加した後の速度オーバーシュート特性. 温度は 300 K, 電界印加方向は $\langle 100 \rangle$ とした.

3.4 1以上の量子生成効率を用いたホットホール散乱確率の検証

3.4.1 実験方法

インパクトイオン化量子生成効率は、インパクトイオン化率とフォノン散乱確率の比に関する情報を含むので、Si 中のホットエレクトロンに対する散乱確率を決定する上で重要な役割を果たした [7]. 量子生成効率 γ は、キャリア分離法によって、電子エネルギーの関数として測定される. 実験原理を図 3.8 に示す. 用いるデバイスは、 n^+ -poly-Si ゲートを有し、 n -Si 基板上に作成された p MOSFET である. ソース、ドレイン端子をグランドに落とし、ゲートに負バイアスを印加することで、電子をゲートから Si 基板に注入する. γ は、基板に注入されたホットエレクトロン 1 個が、平均何個の電子-正孔対を発生するのかを表す量である [27]. 表面空乏層にかかる電界により、電子とホールはそれぞれ逆向きの力を受け、異なる電極に集められる. γ は、ソース/ドレイン電極から検出されるチャネル (ホール) 電流 I_{ch} とゲート (電子) 電流 I_g の比から次のようにもとまる.

$$\gamma = \frac{I_{ch}}{I_g} \quad (3.9)$$

図 3.9 (a) はキャリア分離法に対するエネルギーバンド図である. この実験を成り立たせる 1 つの大きな前提は、ホールの酸化膜トンネル確率は電子のそれに比べ無視できるほど小さいということである. ゲート絶縁膜が SiO_2 の場合、電子に対する障壁エネルギーは 3.1 eV であるのに対し、ホールのそれは約 1.5 eV 大きい [28] ことから、その条件は保障される. 同様の理由から「ホットホールに対する量子生成効率の測定」すなわち図 3.9 (b) に示すような、 p^+ -poly-Si ゲートから p -Si 基板へホールを選択的に注入実験は、実現不可能である. これが、ホールに対する量子生成効率データがない理由である. この事態を打開するため、我々は、1 を超える γ を利用することを考えた. これは、図 3.9 (c) に示すような、FN トンネリング領域におけるキャリア分離実験から得られる.

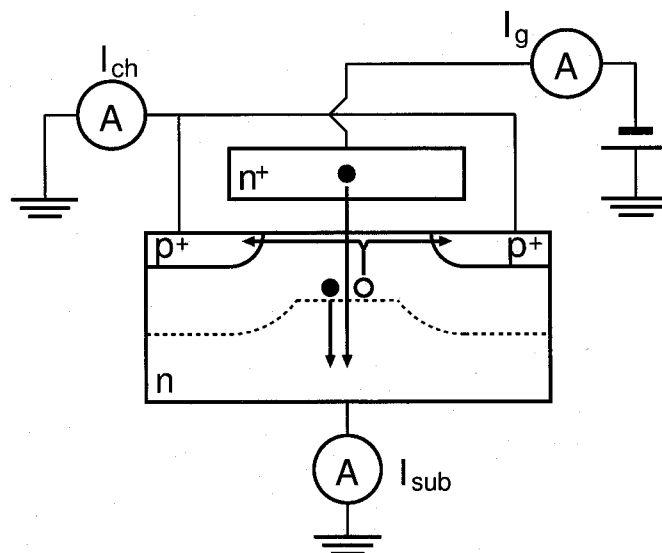


図 3.8: インパクトイオン化量子生成効率を測定するためのキャリア分離法の概念図. 電子とホールを、それぞれ黒丸、白丸で表した. ゲートから注入された電子が、基板でインパクトイオン化を起こし、新たに電子-正孔対を生成する. その後、電子とホールは、空乏層電界によって分離され、それぞれ基板、ソース・ドレイン電極に回収される. 量子生成効率 γ は、 I_{ch}/I_g より見積もられる.

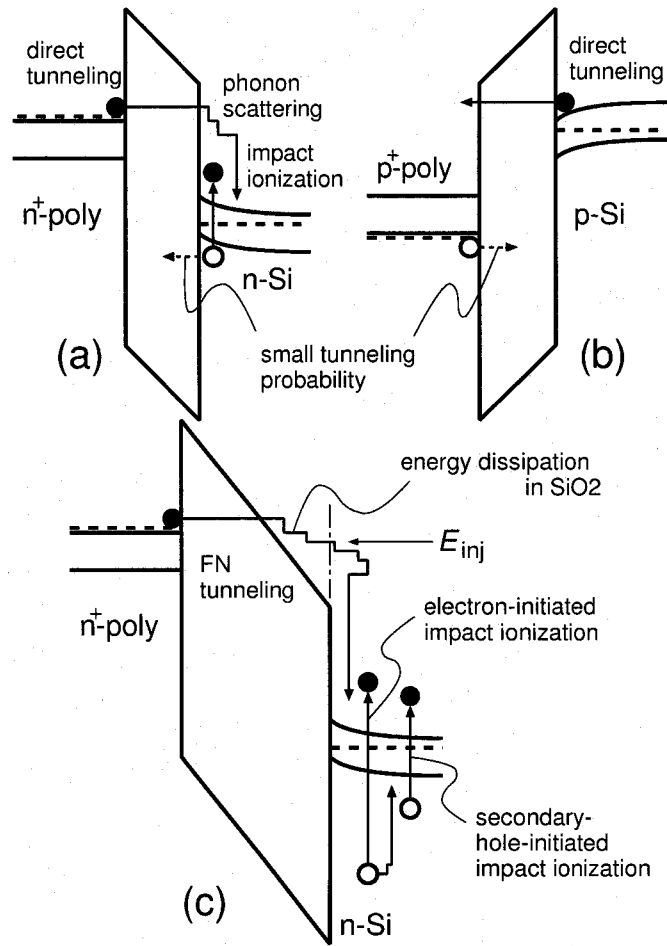


図 3.9: 量子生成効率測定実験に対するエネルギーバンド図. (a) 電子に対する量子生成効率測定 (直接トンネリング領域). 生成されたホールは、ソース・ドレイン電極に回収される. ホールのトンネル確率は、電子のそれと比べ極めて小さいため、ゲートへのホールリーク電流は無視出来る. (b) ホールに対して γ の測定を試みたとしても、ホールのみを選択的にトンネリングさせることができないので、 γ は測定不能である. (c) 本研究で用いた FN トンネリング領域における量子生成効率測定実験. 高いゲート電圧を印加し、1 以上の γ を得る. イオン化後発生する 2 次粒子のうち、ホールもさらなるインパクトイオン化を起こすことが可能である. この情報を、Si 中のホットホール散乱確率の検証に利用することができる.

この場合、3.1 V を超える高い酸化膜電圧を加わり、電子は、高エネルギーを得て Si 基板に注入される. すると、インパクトイオン化後に発生した 2 次粒子の中には、再びインパクトイオン化を起こすほどのエネルギーを持つものもある. したがって、 γ は 1 を超え、その中には、2 次的ホールが起こしたインパクトイオン化の寄与も含まれているはずである. 我々は、1 を超える γ を用いることで、ホール散乱確率の検証を試みた.

3.4.2 実験およびシミュレーション結果

1 を超える γ を計算するため、電子とホールを同時に扱うフルバンド MC シミュレーションを実行した. 電子輸送を取り扱うための散乱確率パラメータは、文献 [10] で報告されたものを用

いた。値は、表 3.1 に示している。なお、この散乱確率は、他の研究機関から発表されたフルバンド MC シミュレータ [22] とほぼ同じであり、多くの電子輸送に関する実験結果との比較を通じて検証がなされてきた。図 3.10 に、 γ のゲート電圧 V_g 依存性の実験値 [29] とシミュレーション結果を示す。ここでのシミュレーションでは、電子輸送のみを考慮したが、比較的低い V_g の下で測った 1 以下の γ に対しては、この仮定は正しい。なぜなら、注入電子のエネルギーは小さく、よってイオン化後に生成された 2 次ホールのエネルギーもさらなるイオン化を起こせないほど小さいため、ホールの γ への寄与が無視できるからである。低 V_g 領域で見られた両者の一致は、シミュレーションの電子散乱モデルの妥当性を示す 1 つの証拠といえる。

図 3.11 は、図 3.10 の縦軸をリニアスケールでプロットしたものである。なお、ここでのシミュレーションには、ホールの寄与も考慮している。 $V_g > 5$ V において、 γ は 1 を超えているが、これは、イオン化後の 2 次粒子が十分なエネルギーを持っているならば、再びインパクトイオン化を起こせることを示している。ゲート電圧が 3.1 V 以上の場合、電子はゲートから FN トンネリングにより SiO_2 の伝導帯に現れ、その後の酸化膜中の走行過程で、非弾性フォノン散乱によりエネルギーを失う。したがって、電子が基板に注入されたときのエネルギーは、単純には決まらない。一方で、量子生成効率のシミュレーションには、Si 基板に注入された直後の電子平均エネルギー E_{inj} が、極めて重要な量となる [30]。本研究では、 E_{inj} を決めるため、 SiO_2 中の電子輸送を MC 法でシミュレーションした。これには、Arnold ら [31] によりまとめられた標準的なモデルを用いた。図 3.12 に、 E_{inj} の計算結果を酸化膜電圧の関数としてプロットした。高木らの実験 [29] で用いられたサンプルのゲート酸化膜厚は 5.8 nm 以下、また印加酸化膜電圧は 6.5 V 以下である。したがって、電子の SiO_2 伝導帯中の走行距離は短く (< 2.9 nm)、大きなエネルギーを得る前に (< 3.3 eV)、電子は酸化膜を通り抜ける。このような条件下では、非極性フォノン散乱による高角散乱で電子の運動量分布が乱雑化される状況 [32] には至らず、電子は準バリスティックに膜内を通

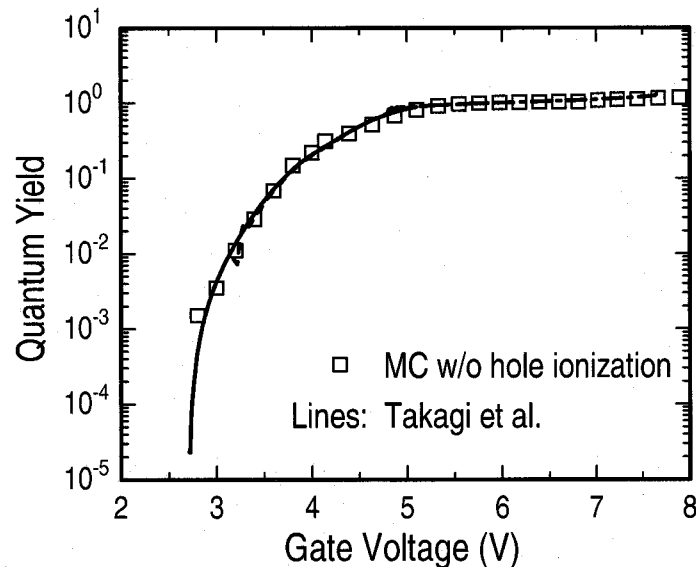


図 3.10: 量子生成効率のゲート電圧依存性。Takagi らの実験値 [29] とフルバンド MC シミュレーション (ただし、電子輸送のみを考慮) の結果を比較した。

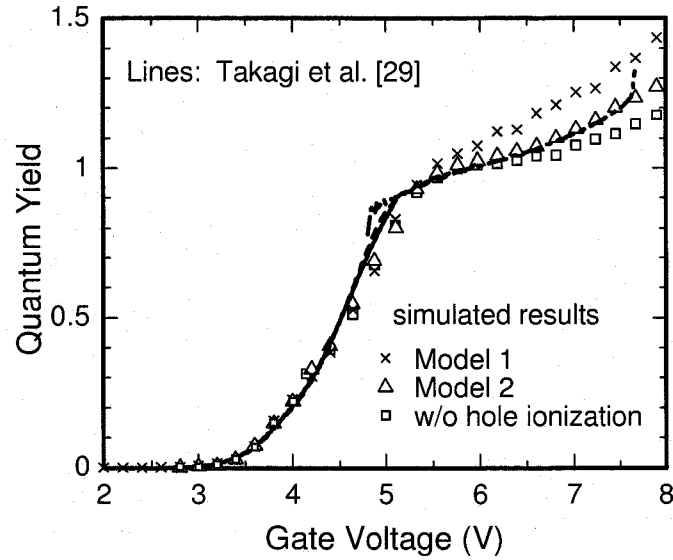


図 3.11: 量子生成効率のゲート電圧依存性. フルバンド MC シミュレーションでは, 電子に加え, ホール輸送モデル 1 またはモデル 2 を取り入れ, 両者の結果を比較した.

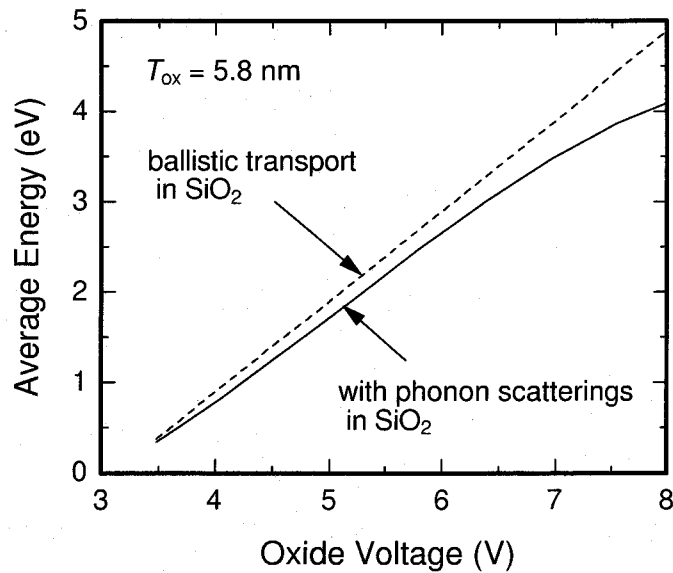


図 3.12: SiO₂ の伝導帯を走行した後の電子の平均エネルギーのシミュレーション結果.

過する. それゆえ, 電子の SiO₂ 層内でのエネルギー損失量はわずかであり, たとえ E_{inj} の見積もりに誤差があったとしても, γ のシミュレーション結果への影響は小さいと考えている. 図 3.11 において電子輸送のみを考慮したシミュレーション結果では, 実験値よりも低めの γ が得られている. これは, 2 次ホールが起こすインパクトイオン化が, γ に与える影響を考慮していないためである. そこで, 3.3 節で導入した 2 つのモデルを用いて, ホール輸送も含めたシミュレーションを行ったところ, γ は増加したが, モデルによって異なる値を示した. モデル 2 は実験と良い一致を示しているが, モデル 1 は実験値を超える結果となった. モデル 1 で用いた RKA は, 特にしきい

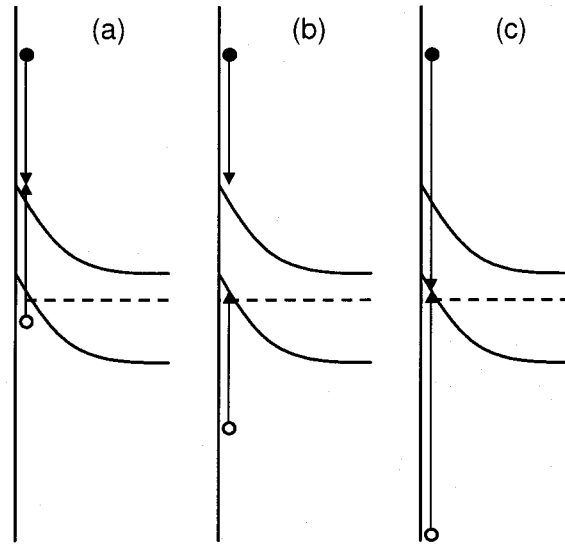


図 3.13: ゲートから Si 基板に電子注入を行った場合に想定されるインパクトイオン化過程. ただし, Si 表面は反転状態にある. 電子を黒丸, ホールを白丸で表した. (a) 通常のインパクトイオン化. (b), (c) minority impact ionization 過程. ホール終状態が反転層内に存在する.

値エネルギー近傍のインパクトイオン化確率を大きめに見積もる傾向にあり [13], それによって 2 次ホール起因のインパクトイオン化が過度に促進されたことも不一致の原因と考えられる. このように, 量子生成効率実験は, 電子のみでなく, ホットホールに対する散乱モデルの検証手段となり得ると考えられる¹.

最後に, Bude ら [4] が以前指摘した minority impact ionization 機構の影響について議論する. 彼らは, Si/SiO₂ 界面の反転層ホールの存在が, イオン化後に発生する 2 次ホール分布の高エネルギー成分 (酸化膜に注入されるほどの高エネルギー領域) を増加させる効果を指摘した. この概念図を図 3.13 に示す. ここで想定される電子注入条件は, ゲートから反転状態にある Si 基板への電子注入であり, 今回行った量子生成効率測定実験と全く同じ状況である. そこで, 我々は, この minority impact ionization 効果も取り入れた MC シミュレーションを試験的に行ったが, γ への影響は無視できるレベルであった. その理由は, インパクトイオン化のしきい値エネルギー (1.1 eV) は, ホールの酸化膜注入のそれ (4.7 eV) と比べ小さいことによる. minority ionization 機構は, 確かに酸化膜注入を起こすほどの高エネルギー領域の分布のテイルには大きな影響を及ぼす [4] のだが, インパクトイオン化を起こす中程度のエネルギー領域には余り影響がなく, 結果的に γ も変動しなかったものと考えられる.

¹我々は, 文献 [16] において, より厚い膜 (6.1~15.7 nm) を使った量子生成効率実験の結果についても触れた. しかし, 膜が厚いと電子が SiO₂ 層を通過する過程で損失するエネルギーが極めて大きく, またその量はキャリア捕獲による酸化膜電界の変調効果によっても影響される. このような理由から, この場合の E_{inj} の見積もりには不確定要素が強く, Si 中のホール散乱確率の検証実験としてはあまりふさわしくないと現在考えている.

3.5 まとめ

Si 中の高エネルギーホールに対する散乱モデルを，量子生成効率の実験とフルバンド MC シミュレーションの結果を比較することで検証した．1 を超える量子生成効率は，Si 中のホール散乱確率を検証する用途に用いることができ，従来のドリフト速度とイオン化係数のみでは不確定性の強かった，フォノン散乱確率とイオン化確率の精度をより厳しく判定することが可能となる．第一原理的に計算したイオン化確率に基づく散乱モデルが，実験値と良い一致を示したが，一方で RKA をベースにしたモデルでは，大きめの量子生成効率を得られた．この結果は，RKA がイオン化率をしきい値近傍で過大評価するという理論的指摘を支持するものである．

参考文献

- [1] D. Sinitsky, F. Assaderaghi, C. Hu, and J. Bokor, IEEE Electron Device Lett. **EDL-18**, 54 (1997).
- [2] J.D. Bude, A. Frommer, M.R. Pinto, and G.R. Weber, Tech. Dig. IEDM, p. 989, Washington, DC, 1995.
- [3] I.C. Chen, S. Holland, K.K. Young, C. Chang, and C. Hu, Appl. Phys. Lett. **49**, 669 (1986).
- [4] J.D. Bude, B.E. Weir, and P.J. Silverman, Tech. Dig. IEDM, p. 179, San Francisco, 1998.
- [5] A. Abramo, L. Baudry, R. Brunetti, R. Castagne, M. Charef, F. Dessenne, P. Dollfus, R. Dutton, W.L. Engl, R. Fauquembergue, C. Fiegna, M.V. Fischetti, S. Galdin, N. Goldman, M. Hackel, C. Hamaguchi, K. Hess, K. Hennacy, P. Hesto, J.M. Higman, T. Iizuka, C. Jungemann, Y. Kamakura, H. Kosina, T. Kunikiyo, S.E. Laux, H. Lin, C. Maziar, H. Mizuno, H.J. Peifer, S. Ramaswamy, N. Sano, P.G. Scrobohaci, S. Selberherr, M. Takenaka, T.-W. Tang, K. Taniguchi, J.L. Thobel, R. Thoma, K. Tomizawa, M. Tomizawa, T. Vogel-sang, S.-L. Wang, X. Wang, C.-S. Yao, P.D. Yoder, and A. Yoshii, IEEE Trans. Electron Devices **ED-41**, 1646 (1994).
- [6] M.V. Fischetti and S.E. Laux, Proc. 26th European Solid State Device Research Conference, p. 813, Bologna, 1996.
- [7] E. Cartier, M.V. Fischetti, E.A. Eklund, and F.R. McFeely, Appl. Phys. Lett. **62**, 3339 (1993).
- [8] M.V. Fischetti and J.M. Higman, in *Monte Carlo Device Simulation: Full Band and Beyond*, edited by K. Hess, p. 123, Kluwer Academic, Boston, 1991.
- [9] P.D. Yoder, V.D. Natoli, and R.M. Martin, J. Appl. Phys. **73**, 4378 (1993).
- [10] T. Kunikiyo, M. Takenaka, Y. Kamakura, M. Yamaji, H. Mizuno, M. Morifuji, K. Taniguchi, and C. Hamaguchi, J. Appl. Phys. **75**, 297 (1994).
- [11] D.L. Kencke, X. Wang, H. Wang, Q. Ouyang, S. Jallepalli, M. Rashed, C. Maziar, A. Tasch, Jr., and S. K. Banerjee, Tech. Dig. IEDM, p. 889, San Francisco, 1998.
- [12] S. Jallepalli, M. Rashed, W.-K. Shih, C. M. Maziar, and A. F. Tasch, Jr., J. Appl. Phys. **81**, 2250 (1997).
- [13] M.V. Fischetti, N. Sano, S.E. Laux, and K. Natori, IEEE J. Tech. Computer Aided Design, <http://www.ieee.org/journal/tcad/accepted/fischetti-feb97> (1997).

- [14] P.D. Yoder, <http://www.ise.ch/degas2.htm>.
- [15] T. Kunikiyo, M. Takenaka, M. Morifuji, K. Taniguchi, and C. Hamaguchi, J. Appl. Phys. **79**, 7718 (1996).
- [16] Y. Kamakura, I. Kawashima, K. Deguchi, and K. Taniguchi, J. Appl. Phys. **88**, 5802 (2000).
- [17] M.L. Cohen and T.K. Bergstresser, Phys. Rev. **144**, 789 (1966).
- [18] M.V. Fischetti and S.E. Laux, Phys. Rev. B **38**, 9721 (1988).
- [19] Y. Kamakura, H. Mizuno, M. Yamaji, M. Morifuji, K. Taniguchi, C. Hamaguchi, T. Kunikiyo, and M. Takenaka, J. Appl. Phys. **75**, 3500 (1994).
- [20] L.V. Keldysh, Sov. Phys. JETP **37**, 509 (1965).
- [21] E.O. Kane, Phys. Rev. **159**, 624 (1967).
- [22] M.V. Fischetti, S.E. Laux, and E. Crabbé, J. Appl. Phys. **78**, 1058 (1995).
- [23] C. Jungemann, S. Yamaguchi, and H. Goto, Proc. 26th European Solid State Device Research Conference, p. 821, Bologna, 1996.
- [24] G. Ottaviani, L. Reggiani, C. Canali, F. Nava, and A.A. Quaranta, Phys. Rev. B **12**, 3318 (1975).
- [25] W.N. Grant, Solid-St. Electron. **16**, 381 (1973).
- [26] 山本 佳史, 私信.
- [27] C. Chang, C. Hu, and R.W. Brodersen, J. Appl. Phys. **57**, 302 (1985).
- [28] S.M. Sze, *Physics of Semiconductor Devices 2nd ed.*, p. 400, Wiley, New York, 1981.
- [29] S. Takagi, N. Yasuda, and A. Toriumi, IEEE Trans. Electron Devices **ED-46**, 335 (1999).
- [30] A. Ghetti, M. A. Alam, J. Bude, and F. Venturi, Tech. Dig. IEDM, p. 873, Washington, DC, 1997.
- [31] D. Arnold, E. Cartier, and D.J. DiMaria, Phys. Rev. B **49**, 10278 (1994).
- [32] M.V. Fischetti, D.J. DiMaria, S.D. Brorson, T.N. Theis, and J.R. Kirtley, Phys. Rev. B **31**, 8124 (1985).

第4章 フルバンドモンテカルロシミュレータ を利用したゲート酸化膜劣化の解析

4.1 はじめに

ゲート酸化膜が 3 nm 以上の MOSFET ゲート酸化膜の経時絶縁破壊寿命の試験には、通常、Fowler-Nordheim (FN) トンネリングを利用した電氣的ストレス法 [1] が用いられる。図 4.1 (a) は、FN ストレス印加時における n MOSFET のエネルギーバンド図である。ここでは、ゲートに正の電圧 V_g を加え、それ以外の電極はグランドに落とし、 p -Si 基板表面を反転させた状態を考えている。酸化膜電界を 10 MV/cm 以上に設定すると、一部の反転層電子は、トンネル効果によって酸化膜障壁を通過するようになる。電子は、その後、高電界の加わる酸化膜中で陽極に向かって加速され、高エネルギーを獲得して、ゲートへと注がれる。そして、電極中でエネルギー緩和を受け、最終的に、ゲート電流として外部に流出する。この時の電子の流れは、ソース/ドレインを供給源に、反転層チャネルと酸化膜を通過して、ゲートで排出される経路をたどるものだが、実は FN ストレス試験中には、ソース、ドレイン、ゲート以外に、基板電極からも電流が観測されることが知られている。この電流は、基板からホールが流れ出すような符号を示し、大きさはゲート電流よりも数桁以上小さい。これまで、その起源として、ゲート発光説 [2] などいくつかのモデルが提出されてきたが、今では、陽極からのホール注入だとする描像 [3, 4] が広く受け入れられている。すなわち、ゲート電極に飛び込んだホットエレクトロンが、エネルギー緩和する際、電子-正孔対を生成、発生したホールの一部が、酸化膜へ飛び込み、そして基板に到達するのである。

この基板電流が、酸化膜絶縁破壊のメカニズムを探る上で、重要なヒントを与えた [3]。上記の FN ストレス実験を、さまざまな V_g に対して実施した場合、 V_g が高いほど酸化膜は早く破壊される。すなわち、絶縁破壊寿命 t_{BD} は、 V_g に強く依存する関数となる。この状況は、絶縁破壊までに酸化膜を通過した総電荷量 (Charge-to-Breakdown):

$$Q_{BD} = \int_0^{t_{BD}} J_g(t) dt \quad (4.1)$$

を比較しても同様で、 Q_{BD} は V_g が大きいほど指数関数的に減少する。なお、ここで J_g は、ゲート電流密度である。しかしながら、比較量として絶縁破壊に至るまでの基板電流の積分値:

$$Q_p = \int_0^{t_{BD}} J_{sub}(t) dt \quad (4.2)$$

をとると、その結果はストレス時の V_g によらず、ほぼ一定値を示すのである。ここで、 $J_{sub}(t)$ は、基板ホール電流をゲート面積で割った量である。この事実は、酸化膜絶縁破壊とホール注入との強い関係を示唆する。例えば、ホールが、酸化膜中に何らかの欠陥 (中性トラップなど [5]) を生じさせ、それが一定の密度まで蓄積した場合、一気に絶縁が破れると仮定することで、酸化膜絶縁破壊を理解することが可能である [6]。現在、このアノードホールインжекションモデルは、信頼性分野における有力な説の 1 つとなっている [7]。

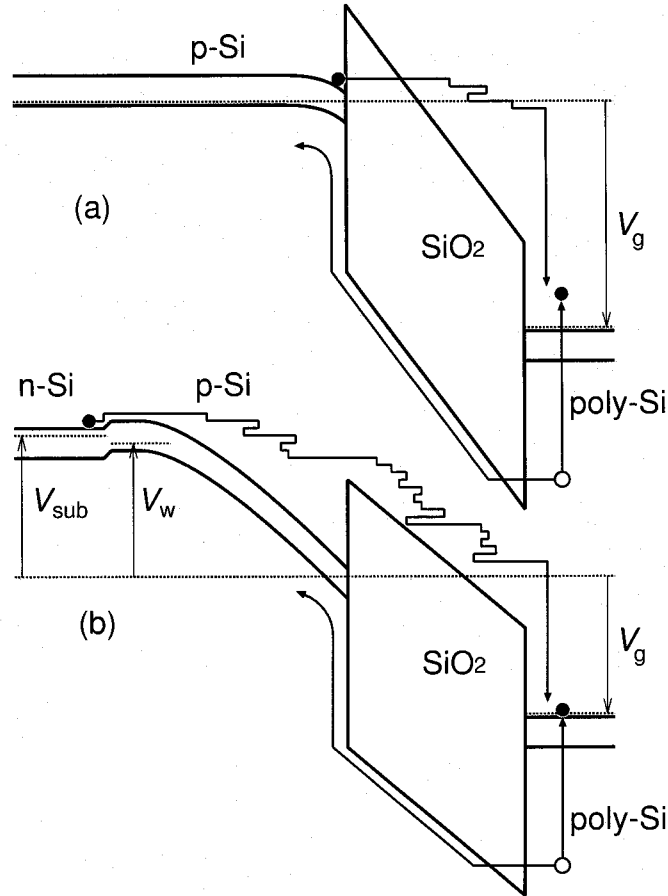


図 4.1: 酸化膜への電氣的ストレス印加時のエネルギーバンド図. (a) Fowler-Nordheim(FN) トンネリング注入法. ゲートに正のバイアス V_g を印加し, 反転層電子を FN トンネリング機構により酸化膜に注入する. 陽極である n^+ -poly-Si ゲートに飛び込んだ電子は, エネルギー緩和の過程で電子-正孔対を生成し, 一部のホールが酸化膜へと注入される. このホール電流は基板電流として観測される. (b) 基板ホットエレクトロン (SHE) 注入法. ゲートに正バイアス V_g を印加して反転層を形成させるとともに, p -ウエルには負バイアス V_w を加えて空乏層を広げる. 基板 n -Si と p -ウエルの pn 接合に順方向バイアス $V_{sub} - V_w < 0$ を加えることにより, 基板からウエルへ電子を注入する. 拡散により空乏層端に到達した電子は空乏層電界による加速を受け, Si/SiO₂ 界面に衝突, 障壁エネルギーを超えうる十分なエネルギーを持った電子が熱注入される. この測定では, n -Si 基板と p -Si ホール電流のみを分離して測定することはできない.

LSI 中における MOSFET の動作を実際に考えると、FN 注入とは異なったストレスを酸化膜がこうむる場合がある。例えば、トランジスタがオンの時、ソース-ドレイン間電圧によって加速された電子は、チャネルホットキャリアとなってゲート酸化膜に衝突し、一部が酸化膜へと飛び込む [8]。このように、注入陰極側で加熱された電子が酸化膜と衝突するような状況を再現するストレス試験法に、基板ホットエレクトロン (Substrate Hot Electron: SHE) 注入 [9, 10] がある。図 4.1 (b) は、SHE ストレス印加時における n MOSFET のエネルギーバンド図である。サンプルには、 n -Si 基板上の p -ウエル領域内に作成した n MOSFET を用いる。ソース/ドレインは接地、ゲートには正の V_g を加え、表面を反転させる。一方、 p -ウエルには、負バイアス V_w を加えて、表面空乏層を広げ、さらに、 n -基板と p -ウエルの pn 接合に順方向バイアス $V_{sub} - V_w < 0$ を印加することで、少数キャリアである電子を p -ウエル領域へと注入する。 p -Si 中で再結合をまぬがれた電子の一部は、空乏層端に到達、空乏層電界によって Si/SiO₂ 界面に向かって加速される。そして、界面に衝突した電子の中で、SiO₂ の障壁エネルギーを超えるほどのエネルギーを獲得しているものが、酸化膜内へと熱的に注入される。この方法の利点は、チャネルホットエレクトロン注入とは異なって、面積的に均一なホットエレクトロン電流をゲート酸化膜に注入できること、さらに、酸化膜電界、注入電子エネルギー、注入電子電流を、それぞれ、 V_g 、 V_w 、 V_{sub} を調節することで、独立に制御できる点などである。ところで、このストレス状況下においても、陽極から酸化膜へのホール注入が起こっていることは十分考えられよう。ただ、そのとき、 Q_p が、FN ストレスの場合と同じように、酸化膜絶縁破壊を決定する良い指標量となっているかについては、全くのところ自明ではない。なぜなら、この実験においては、素子構造上、陽極ホール電流を分離して測定することが不可能だからである (p -ウエルには、 n -基板から注入される電子の再結合電流も検出されるため)。

そこで、本章では、実験的には検出困難な SHE ストレス時のアノードホールインжекション電流を、計算機シミュレーションで見積もることにより、SHE ストレス時の Q_p 値を予測し、さらに、その Q_p を FN ストレス時に実測される値と比較することで、SHE ストレスによって引き起こされる酸化膜劣化のメカニズムが果たして FN ストレスのそれと類似したものであるか否かについて推察する [10]。用いるキャリア輸送シミュレーションは、MC 法である。基板 p -Si およびゲート poly-Si 中のキャリア輸送には第 2 章、第 3 章にて説明したフルバンド MC シミュレータ、また SiO₂ 中では Arnold ら [11] によってまとめられた解析バンド MC モデルを使用する。本章では、まず 4.2 節で実験方法およびシミュレーション方法を説明する。続いて、4.3 節では、実験およびシミュレーション結果を紹介し、絶縁破壊メカニズムに関する考察を行う。そして最後に 4.4 節でまとめとする。

4.2 実験とシミュレーションの方法

4.2.1 使用した試料と実験方法

実験で使用した試料は、 n -Si 基板上の p -ウエル領域に作製された n MOSFET である。構造の模式図を図 4.2 に示す。ゲート電極材料は、 n^+ -poly-Si、またゲート絶縁膜には、SiO₂ を使用している。酸化膜厚は 5 nm、チャネルドーピング濃度は $5 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$ である。

ストレス実験では、多数の MOSFET のゲート酸化膜を、FN または SHE 注入ストレスにより破壊し、各々の Q_{BD} を記録した。実験条件として、FN ストレスでは、 V_g を 6 ~ 7 V の範囲で、一方、SHE ストレスでは、 V_g と V_w をそれぞれ、6 ~ 7 V および -5 ~ -6 V の範囲で振り、 Q_{BD} の違いを調べた。ストレス電圧の印加、および電流測定には、半導体パラメータアナライザ HP-4156A を利用し、ゲート電流の時間変化を急激な電流増加、すなわち酸化膜絶縁破壊、が観測されるまで

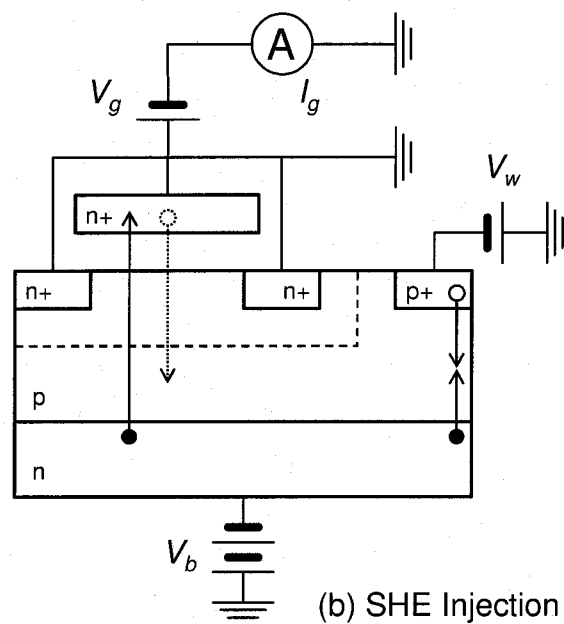
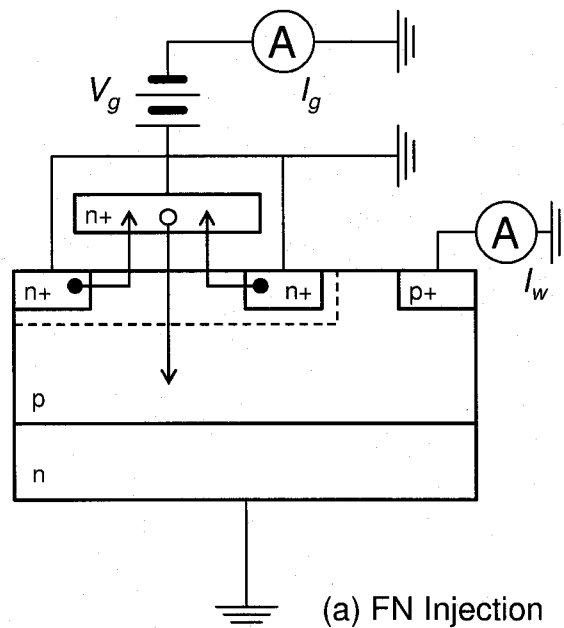


図 4.2: ゲート酸化膜への 2 種類の電子注入方法. n -Si 基板上の p -ウェル領域に作製された n MOSFET 内部のキャリアの動きを模式的に示している. (a) FN 注入ストレス法. ゲートに酸化膜電界を 10 MV/cm 以上とするような高い正バイアスを印加し, FN トンネリング機構によって反転層電子を酸化膜へと注入する. 陽極内部で発生したホールが基板側に逆注入されるアノードホールインジェクション電流は, 本構造の場合, ウェル電流 I_w として検知される. (b) SHE 注入ストレス法. n -Si 基板から p -ウェルにダイオード順方向電流として注入された電子は, 空乏層端まで達すると電界によって表面へと加速され, 高エネルギーを得た後に, ゲート酸化膜に熱注入される. この際, 原理的には, アノードホールインジェクション電流は発生していると思われるのだが, その電流のみを端子電流として取り出すことはできない.

モニターした。

4.2.2 シミュレーション方法

FN および SHE 注入ストレス印加時の MOS 構造中の電子とホール挙動を、MC シミュレーションによって解析した。特に、SHE 注入時において酸化膜を通過するホール電流量は実験的に観測不可能であるため、シミュレーションによる見積もりが必要となる。

図 4.3 に、SHE 注入に対するシミュレーション方法を図解する。基板 p -Si、ゲート酸化膜、ゲート n -poly-Si の 1 次元構造を考えた。基板空乏層のポテンシャル分布は、MC シミュレーションを実行する前に、Poisson 方程式を解くことで見積もり、MC シミュレーション中には、時間的に固定したポテンシャル分布を使用した。また、今回解析対象とする素子で用いられる酸化膜の厚みは 5 nm と比較的薄いため、ストレス印加中の膜内での電荷捕獲による酸化膜電界の変化は無視できるものとした。Si 基板における電子加速と、poly-Si ゲートにおける電子のエネルギー散逸、インパクトイオン化による電子-正孔対生成の過程は、フルバンド MC シミュレーション [12-14] で計算した。一方、 SiO_2 中の電子のシミュレーションは、Arnold ら [11] により報告された解析バンド MC モデルを利用した。poly-Si ゲート内のインパクトイオン化で発生した 2 次ホールの状態は Kane [15] の random- k 近似法を用いて決定した。ホールのゲート酸化膜への注入は、 SiO_2 の障壁エネルギーの鏡像力による低下を考慮し、WKB 近似によりトンネル確率を計算した。

4.3 結果と考察

ここでは、まず、異なるストレス条件下での Q_{BD} の実験結果を示し、その特徴を説明する。次に、この結果を解釈するために、特に SiO_2 ゲート絶縁膜の陽極側における電子エネルギー分布に

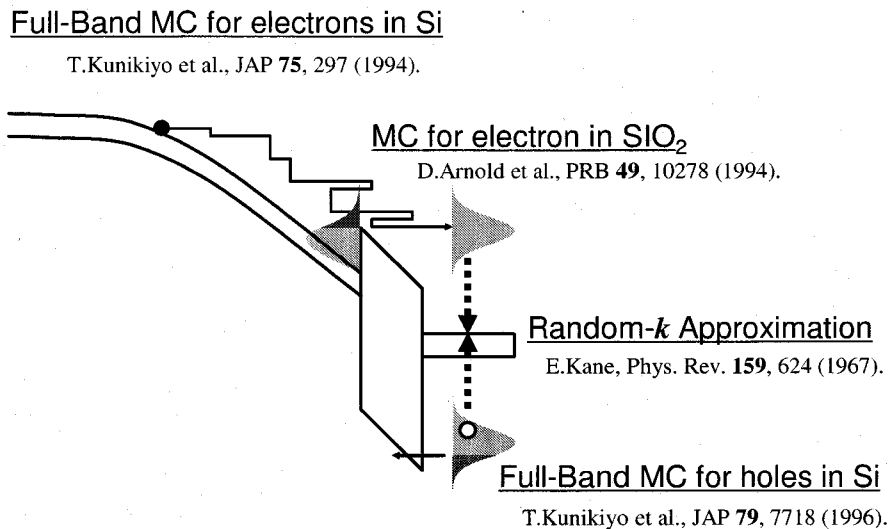


図 4.3: SHE 注入シミュレーションの方法。 p -Si 基板の表面空乏層領域での電子加速、poly-Si ゲート電極内部の電子エネルギー緩和過程については、Si 用フルバンド MC シミュレータ [12-14] で取り扱う。一方、 SiO_2 ゲート絶縁膜内の電子輸送過程のシミュレーションには、Arnold ら [11] により開発された解析バンド MC 法を用いる。インパクトイオン化後の 2 次ホールの状態は Kane [15] の random- k 近似を利用して決定した。

注意を払って、シミュレーション結果を解析する。引き続き、シミュレーションから得られたデータをもとに、電子注入により引き起こされる酸化膜絶縁破壊の要因について考察を加える。

4.3.1 酸化膜絶縁破壊の実験結果

図 4.4 は、本研究で行った酸化膜絶縁破壊実験の結果である。FN および SHE 注入ストレスをさまざまなバイアス条件で実施し、それぞれで得られた Q_{BD} を、ゲート電圧 V_g に対してプロットした。なお、SHE 注入においては、2 種類の異なるウエル電圧 V_w を用いた場合の結果を比較している。この図より、FN と SHE ストレスでは、使用した V_g の値が 2~3 V 異なるにもかかわらず、同程度の Q_{BD} が得られていることが分かる。以前、酸化膜に加わる高電界が原因で格子欠陥が発生し、それが絶縁破壊の原因であるとするモデル [16] が提案されたが、少なくとも酸化膜電界のみによって絶縁破壊寿命が決定付けられるわけではないといえる。さらに、SHE 注入においては、 Q_{BD} が、 V_g だけではなく、 V_w にも依存している。 V_w が、基板側から注入する電子のエネルギーを決めるパラメータであったことを思い起こすと、電子エネルギーが酸化膜寿命を左右する要因となっていることが推測できる。そこで次節では、特に酸化膜周りに存在する電子のエネルギーといった観点に着目して、MC シミュレーションの結果を解析する。

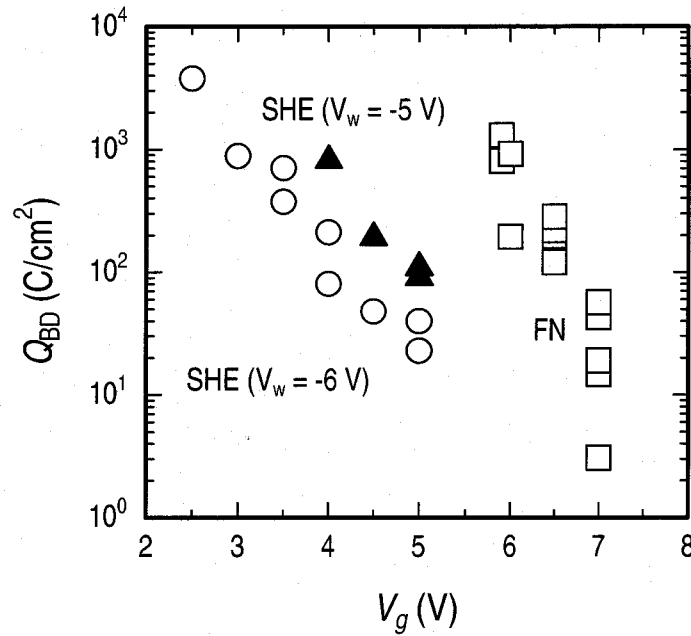


図 4.4: Q_{BD} の測定結果の V_g 依存性. FN ストレス (白四角), SHE ストレス: $V_w = -5$ V (黒三角), SHE ストレス: $V_w = -6$ V (黒三角) の実験結果を、 V_g を横軸にとって比較した。

4.3.2 電子エネルギー分布のシミュレーション結果

図 4.5 は、MC シミュレーションによる SHE 注入解析の 1 例である。Si 基板からスタートした 1 個の電子の軌跡を、横軸に距離、縦軸にエネルギーをとってプロットした。基板空乏層領域の電界によって酸化膜障壁エネルギー (3.1 eV) 以上にまで加速された電子が、酸化膜内部に飛び込んでいる。電子は酸化膜中に入ると急激にエネルギーを損失しているが、これは、酸化膜中では、電子散乱確率が高く、エネルギー緩和距離が極めて短いことに起因している。その後、陽極に注入された電子は、速やかにインパクトイオン化を起こす。電子はその際、エネルギーを 2 次電子とホールに分配するので、大きくエネルギーを失う。

図 4.6 は、SiO₂ 膜中における電子集団分布のスナップショットである。注入法やバイアス条件を変えて、アンサンブル MC シミュレーションを行い、定常状態における瞬間的な電子分布を比較した。なお、ここで、縦軸はエネルギーであり、陽極の電位が基準となるよう三者を揃えている。それぞれで膜内部の電子分布の様子が、大きく異なっていることが分かる。まず、図 4.6 (a) の $V_g = 5$ V の FN 注入の場合においては、膜内部の電子の走行距離が短いため、電子はほとんどエネルギーを失わず、準バリスティックに酸化膜を通り抜けている。これは、図 4.6 (c) の $V_g = 7$ V の FN 注入においても同様であり、この場合、エネルギーを失った電子分布が若干見受けられるものの、おおかたの電子は、図中で水平、すなわち準バリスティック的に走行している。ところが、図 4.6 (b) においては、全く事情が異なる。まず、SHE 注入の場合、電子は、全ての酸化膜領域 (5 nm) を走行せねばならず、また、注入時の初期電子エネルギーが大きく散乱確率も高いので、電子は膜内で激しいエネルギー損失を受ける。その結果、電子分布は、図中で酸化膜伝導帯端とほぼ平行、つまり電界から得るエネルギーと散逸するエネルギーが釣り合った定常状態で、SiO₂/poly-Si 界面へと到達する。ここで、酸化膜のアノード側における電子エネルギーに着目して、3 つの結果

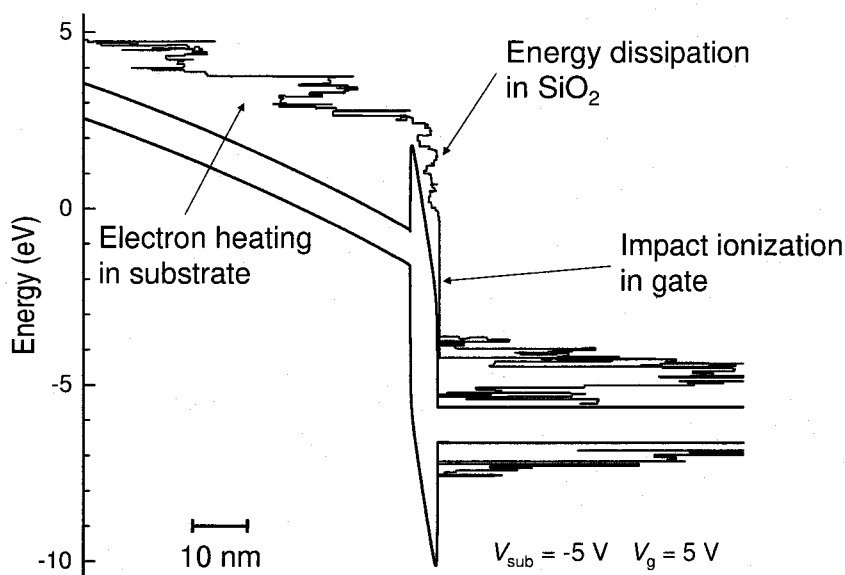


図 4.5: SHE 注入のシミュレーションで得られた電子軌跡の例。基板空乏層内部で加速された 1 個の電子が、SiO₂ 層を通過し、ゲートに注入される過程を示している。ゲート内では、インパクトイオン化によって電子-正孔対が新たに発生している。

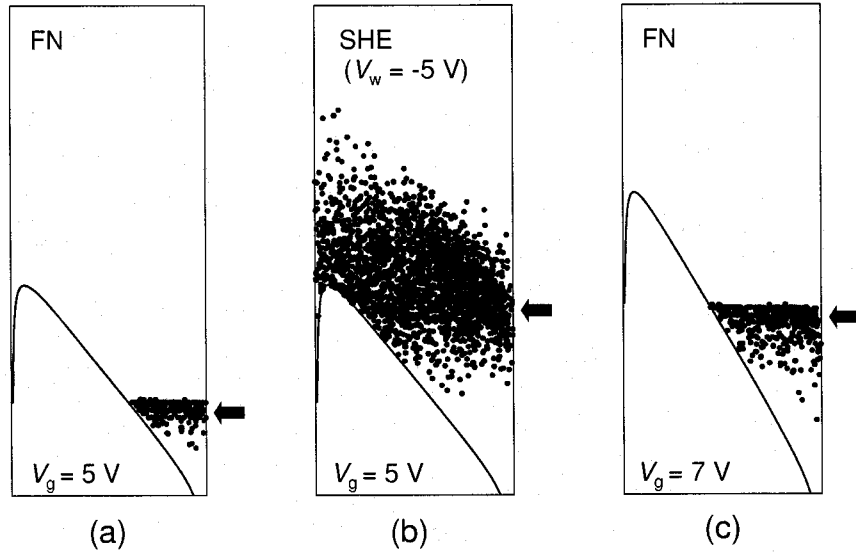


図 4.6: FN および SHE 注入シミュレーションで得られた瞬間的な電子分布の例. 横軸に距離, 縦軸にエネルギーをとっている. なお, エネルギーは, 陽極の電位が基準となるように揃えた. 図中の線はゲート SiO_2 の伝導帯の底, 点は個々の電子を表している. また矢印は, $\text{SiO}_2/\text{poly-Si}$ 界面に到達した電子の平均エネルギーを示している.

を比較しよう. 図中における矢印は, $\text{SiO}_2/\text{poly-Si}$ 界面に到達した電子の平均エネルギーを示している. 図 4.6 (b) と (c), すなわち $V_g = 5 \text{ V}$ の SHE 注入 ($V_w = -5 \text{ V}$) と, $V_g = 7 \text{ V}$ の FN 注入が (陽極電位を基準として) はほぼ同程度の平均エネルギーを有しているのに対し, $V_g = 5 \text{ V}$ の FN 注入の場合は, より低いエネルギー分布を示していることが分かる. ここで, 図 4.4 の実験結果を振り返ってみよう. ちょうど図 4.6 (b) と (c) の条件に相当する Q_{BD} 値はほぼ等しいが, (a) に相当する条件の Q_{BD} 値のみかなり大きな値となることが実験結果の外挿により予想される. この結果は, 陽極に到達した電子のエネルギーと酸化膜絶縁破壊の相関を強く示唆するものといえる.

図 4.7 に, SHE 注入時の酸化膜内部における電子エネルギー分布を示す. 電子が酸化膜に注入された直後, および陽極に注入される直前の電子エネルギー分布を, 異なるバイアス条件に対し比較した. 結果を見ると, 注入直後の電子エネルギーは, 基板空乏層電界を決定する電圧 V_w に強く依存している. しかし, 酸化膜領域を通過した後の電子エネルギー分布は, 高エネルギーテイル部分を除いて, V_w よりも, むしろゲート電圧 V_g に依存している. これは, 図 4.6 でも見たように, 電子は酸化膜を通過する途中で多数回のフォノン散乱を受けるため, 注入直後に持っていたエネルギーに関する情報を消失するためであると考えられる. 図 4.4 の実験結果において, SHE に対する Q_{BD} が, あまり V_w に依存しないのはこのためであると考えられる.

4.3.3 絶縁破壊実験結果の解釈

MC シミュレーションによる電子分布解析の結果, 陽極に注入される電子のエネルギーと Q_{BD} の間には, 強い相関があることが示唆された. 陽極に注入される電子エネルギーが高ければ高いほど, 陽極内でインパクトイオン化が高頻度で生起し, またそのとき生成される 2 次ホールエネルギーも高くなる. したがって, たとえ同じゲート電流であっても, ストレス条件によってアノード

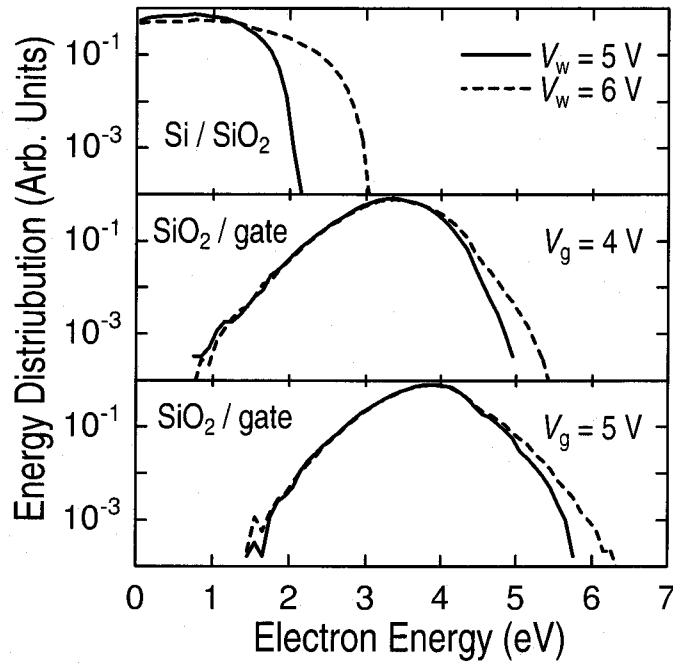


図 4.7: SiO₂ 内部における電子エネルギー分布のシミュレーション結果. 実線および点線は, それぞれ $V_w = 5$ V と 6 V の場合の結果である. 上段: 基板 Si から SiO₂ へ注入された直後の電子エネルギー分布. 中段: SiO₂ からゲートに注入される直前の電子エネルギー分布. ただし, $V_g = 4$ V の場合. 下段: 中段と同様で, $V_g = 5$ V の場合.

ホールインжекション電流は異なる. すなわち, 基板ホール電流は, 陽極に飛び込んだ電子エネルギーを評価するための良い指標量といえる. 本研究ではさらに, 実際にアノードホールインжекション電流をシミュレーション結果から見積もり, Q_{BD} のバイアス, およびストレス条件依存性の再現を試みた.

図 4.8 は, FN 注入時のアノードホールインжекション効率 $J_p/J_g \equiv \alpha$ のシミュレーション結果である. 電子 1 個を陽極へ注入した際, 平均的に何個のホールが陽極から酸化膜に注入されるのかを求めている. なお, FN 注入の場合, J_p の実測が可能であり, 図 4.8 には測定値も同時にプロットした. 本研究のシミュレーションと実験結果の間には, 完全な定量的一致は見られなかったが, 酸化膜電界および膜厚に対する依存性を比較的良く再現することができた. なお, ここでの不一致の原因としては, (1) 酸化膜へのホール注入を取り扱う際のモデリングの不備や, (2) poly-Si 中のキャリア輸送モデルの不備などが考えられる. (1) に関しては, ホールは SiO₂ の格子系と強く結合するため, 特異な輸送特性を示すことが知られていて [17], 例えば, 酸化膜内での強い散乱が, いったん酸化膜へ進入したホールを陽極に戻すなどの効果 [18] が考えられるが, 現時点で確立されたモデルはまだなく今回は考慮していない. また, (2) については, poly-Si のグレイン境界での散乱 [19], キャリア-キャリア散乱 [20], プラズモン散乱 [21] などの影響が考えられるが, 今回は, フォノン散乱とインパクトイオン化のみを考えた Si 内のキャリア輸送問題として取り扱った. ただ, 図 4.8 では, 実験との際は 1 桁以内に抑えられており, そのファクタはほぼ一定である. また, α のバイアス条件に対する変化の傾向も捉えられている. そこで, 今回は, これらモデルの不備が, ストレス条件によらず計算結果に一定のファクタの誤差を与えると仮定して, 以下の考察を試みる.

図 4.9 に、FN および SHE 注入ストレス実験で得られた Q_{BD} と、陽極ホール注入効率 α の逆数のシミュレーション結果を同時にプロットした。 Q_{BD} と Q_p との間には

$$\begin{aligned} Q_{BD} &= \int_0^{t_{BD}} J_g(t) dt \\ &= \int_0^{t_{BD}} \frac{J_p(t)}{\alpha} dt \\ &= \frac{Q_p}{\alpha} \end{aligned} \quad (4.3)$$

なる関係がある。ここで、 α は時間に依存しないと仮定した。アノードホールインジェクションモデルの精神によれば、 Q_p は定数となる。そしてもし、 Q_p が一定であると仮定すると、 Q_{BD} は、 α^{-1} に比例することとなる。図 4.9 を見ると、バイアスやストレス方法が異なる場合の Q_{BD} の変化を、 α^{-1} のシミュレーション結果が良好に捕らえていることが分かる。

我々は、この結果が直ちに、ホールが酸化膜の破壊原因であることの証明につながるとは考えていない。例えば、ホットエレクトロンによって $\text{SiO}_2/\text{poly-Si}$ 界面に存在する Si-H 結合が破壊され、プロトンが発生し、それが酸化膜破壊の原因となることも考えられる [22]。より突っ込んだ議論を行うためには、陽極から酸化膜へのホール注入過程に対して、より精密なシミュレーション環境を整備する必要がある。今回の一連の実験、およびそれを理解するための MC シミュレーション結果からいえることは、FN および SHE ストレスによる酸化膜絶縁破壊は、(1) 酸化膜電界が直接的要因ではなく、(2) 電子の、特に酸化膜陽極側でのエネルギーが、電子 1 個あたりの酸化膜劣化効率を決定している¹、ということである。

4.4 まとめ

FN および SHE 注入ストレス実験およびそのシミュレーション解析を、酸化膜厚 5 nm の MOSFET を対象として行い、絶縁破壊と電子エネルギーの関係を調べた。電子エネルギーの解析に MC シミュレーションを活用することで、以下の知見を得た。

- 酸化膜絶縁破壊寿命は、酸化膜に加わる電界のみの関数では決まらず、同じ酸化膜電界の下でも、注入する電子のエネルギーが高いほど早く劣化が進行する。
- ゲート酸化膜内部の陽極側における電子エネルギーが、 Q_{BD} を決定づける。

陽極側の電子エネルギー、あるいはその指標量である基板ホール電流を比較することにより、注入法やバイアス条件によらず、統一的にゲート酸化膜劣化を解釈することが可能である。

¹この結論は、我々の 1997 年の報告、すなわち SHE 注入で、電子が酸化膜に注入された直後、つまり陰極側の電子エネルギーが酸化膜破壊を決定付けるとした結果とは異なる [23]。文献 [23] の SHE 実験では、アバランシェ効果を利用して基板から電子を供給したため、電子エネルギーの見積もりが難しく、これに対しては、今後さらに注意深い解析が必要と思われる。具体的には、アバランシェ過程により極めて高いエネルギーの電子が酸化膜に注入されていた可能性があり、インパクトイオン化フィードバック効果 [24] などとも考慮したシミュレーション方式の再検討を行った上で、本論文の結果と比較すべきであると考えている。

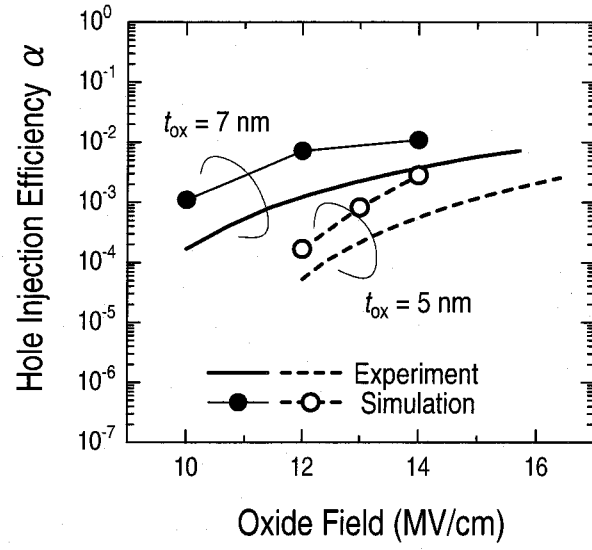


図 4.8: FN 注入時のアノードホールインジェクション効率 α の酸化膜電界依存性. シミュレーション結果 (印) と実験結果 (線) を比較した.

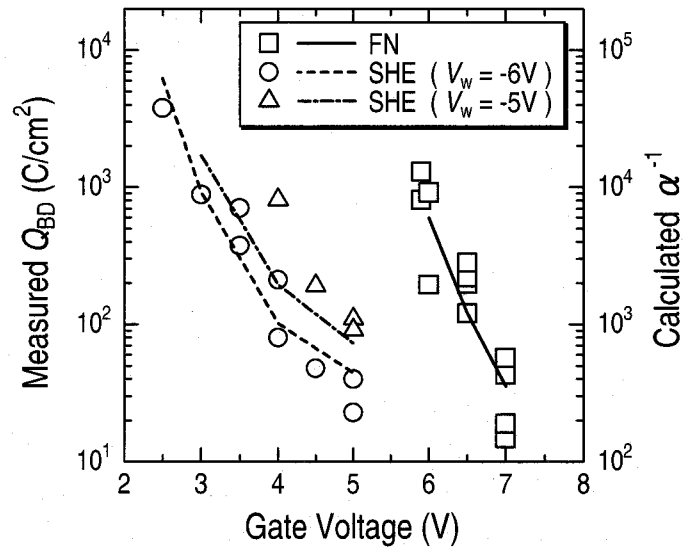


図 4.9: Q_{BD} の実験値 (印), および α^{-1} のシミュレーション結果 (線) の V_g 依存性.

参考文献

- [1] 小柳光正, サブミクロンデバイス II, 第3章, 丸善, 1988.
- [2] M. Rasras, D. de Wolf, G. Groeseneken, B. Kaczer, R. Degraeve, H.E. Maes, Tech. Dig. IEDM, p. 465, Washington, DC, 1999.
- [3] I.C. Chen, S. Holland, and C. Hu, IEEE Electron Device Lett. **7**, 164 (1986).
- [4] P. Palestri, M. Pavesi, P. Rigolli, L. Selmi, A. Dalla Serra, A., A. Abramo, F. Widdershoven, E. Sangiorgi, Tech. Dig. IEDM, p. 97, San Francisco, 2000.
- [5] A. Yokozawa, A. Oshiyama, Y. Miyamoto, S. Kumashiro, Tech. Dig. IEDM, p. 703, Washington, DC, 1997.
- [6] R. Degraeve, G. Groeseneken, R. Bellens, J.L. Ogier, M. Depas, P.J. Roussel, and H.E. Maes, IEEE Trans. Electron Devices **45**, 904 (1998).
- [7] M.L. Green, E.P. Gusev, R. Degraeve, and E.L. Garfunkel, J. Appl. Phys. **90**, 2057 (2001).
- [8] 武田英次, ホットキャリア効果, 日経マグローヒル社, 1987.
- [9] K. Umeda and K. Taniguchi, J. Appl. Phys. **82**, 297 (1997).
- [10] Y. Kamakura, A. Ishida, and K. Taniguchi, Physica B **272**, 532 (1999).
- [11] D. Arnold, E. Cartier, and D.J. DiMaria, Phys. Rev. B **49** 10278 (1994).
- [12] T. Kunikiyo, M. Takenaka, Y. Kamakura, M. Yamaji, H. Mizuno, M. Morifuji, K. Taniguchi, and C. Hamaguchi, J. Appl. Phys. **75**, 297 (1994).
- [13] Y. Kamakura, H. Mizuno, M. Yamaji, M. Morifuji, K. Taniguchi, C. Hamaguchi, T. Kunikiyo, and M. Takenaka, J. Appl. Phys. **75**, 3500 (1994).
- [14] T. Kunikiyo, M. Takenaka, Y. Kamakura, M. Yamaji, H. Mizuno, M. Morifuji, K. Taniguchi, and C. Hamaguchi, J. Appl. Phys. **79**, 7718 (1996).
- [15] E.O. Kane, Phys. Rev. **159**, 624 (1967).
- [16] J.W. McPherson, V.K. Reddy, and H.C. Mogul, Appl. Phys. Lett. **71**, 1101 (1997).
- [17] B.M. Deb and A.N. Chandorkar, J. Appl. Phys. **77**, 5248 (1995).
- [18] G.V. den Bosch, G. Groeseneken, and H.E. Maes, Solid-State Electron. **37**, 393 (1994).
- [19] R.P. Joshi and R.F. Wood, J. Appl. Phys. **84**, 3197 (1998).

- [20] M.V. Fischetti and S.E. Laux, J. Appl. Phys. **89**, 1205 (2001).
- [21] M.V. Fischetti, Phys. Rev. B **31**, 2099 (1985).
- [22] J. Sune, and E. Wu, VLSI Symp. Tech. Dig., p. 97, Kyoto, 2001.
- [23] Y. Kamakura, H. Utsunomiya, T. Tomita, K. Umeda, and K. Taniguchi, Tech. Dig. IEDM, p. 703, Washington, DC, 1997.
- [24] J. Bude, VLSI Symp. Tech. Dig., p. 101, Kyoto, 1995.

第5章 アンサンブルモンテカルロ/分子動力学法による低電界電子移動度解析

5.1 はじめに

低電界電子移動度は、10 nm 級の超微細 MOSFET においても、依然として、素子性能を左右する重要な指標とみなされている [1]。この移動度を決定付けるキャリア散乱機構としては、フォノン散乱、界面凹凸散乱のほか、イオン化不純物散乱が重要な因子として数えられる。特に、極微細 MOSFET においては、電子の走行するチャネル部のイオンのみならず、ソース [1] やゲート [2-5] 等、チャネルから離れた領域内のいわゆる「リモートイオン」が移動度を深刻に低下させるとの報告もある。このような理由から、デバイスシミュレーションの分野においても、複雑なイオン化不純物散乱過程を高精度に解析する手法の開発が望まれている。

ドリフト-拡散法に代表される流体モデルでは、通常、イオン化不純物散乱が電気伝導に与える影響を、移動度の不純物濃度依存性として取り入れる。ここでの濃度とは、キャリア移動度を与える地点における局所的不純物濃度を指すのだが、一方で、移動度式は、一様に不純物原子がドーパされたバルク結晶に対する測定結果をもとに作られている。そのため、キャリアとイオン化不純物の存在する場所が離れている場合など、イオン化不純物の分布が一様と仮定できない状況には対応することができない。もし、シミュレーションにこの効果を反映したいのならば、新たな移動度モデルを別途導入する必要がある。このような状況は、粒子モデル (MC デバイスシミュレータ) でも全く同じである。すなわち、イオン化不純物散乱確率が、同じく局所不純物濃度、さらには局所キャリア濃度の関数として与えられる。キャリア濃度依存性は、イオン化不純物の遮蔽効果を反映するために考慮されるのだが、やはり、イオン化不純物とそれを遮蔽するキャリア分布が空間的に離れた場合や、イオン化不純物濃度が遮蔽長の範囲内で著しく変化している場合など、現実のデバイス内部の複雑な状況に対応しきれないことが多い。

空間的に一様な理想的状況下でのイオン化不純物散乱に限ってみても、その解析は必ずしも容易ではない。従来、イオン化不純物散乱の理論的解析においては、2 体散乱・1 次摂動といった近似計算 (Conwell-Weisskopf モデル [6] や Brooks-Herring モデル [7] など) で散乱確率を導出し、その影響を移動度に反映させるという方法が一般的であった [8]。しかし、例えば高濃度の不純物が存在する状況下で複数の不純物から同時に相互作用を受ける多体散乱の影響はどうかなど、解析的アプローチでは定式化が困難な問題がいろいろと指摘されている [9]。実際、バルク *n*-Si 中の低電界電子輸送を Brooks-Herring モデルで解析した場合、実験値と比べ移動度が高めに見積もられることが知られている [10]。

上記の困難を解決する数値シミュレーション法として、アンサンブルモンテカルロ (EMC) 法と分子動力学 (MD) 方法を組み合わせた EMC/MD 法 [11-18] が報告されている。これは、キャリア-イオン化不純物間およびキャリア-キャリア間の Coulomb 相互作用を、古典力学に基づく分子動力学法で直接的に取り扱う手法である。具体的には、半導体結晶中のキャリアの運動を追跡する際に、結晶の周期ポテンシャルの影響 (=有効質量の変化) と格子振動の影響 (=フォノン散乱) に

対しては、MC 法で取り扱うが、点電荷間の Coulomb 相互作用については、Newton の運動方程式を解くことにより MD 的に取り扱う。MD という性格上、本手法は膨大な計算時間を要するため、あまり一般的には用いられてこなかったが、例えば、移動度対不純物濃度の実験結果を再現するなどの成果が報告されている [13]。デバイス内部の複雑な状況化における Coulomb 散乱の効果を微視的視点から理解する、あるいは実用的なデバイスシミュレータに取り入れるための簡易モデルの構築、などの用途が考えられる。ただし、微細化に伴い、デバイス内部に含まれるイオン化不純物原子やキャリアの絶対数が減少していること、また計算機の演算能力の向上をあわせて考えると、EMC/MD 法を現実のデバイスシミュレーションに適用することも非現実的とはいえない。

本研究は、EMC/MD 法を将来的にデバイスシミュレーションに応用することを念頭にいれ、その手法の妥当性や問題点を探ることを目的とする。今回は、解析を容易とするため極力単純な系を想定し、遮蔽効果などの物理機構が正しく取り込まれるかなどに関する検証を行った。我々は、まず、5.2 節において、バルク Si 中の低電界電子輸送を解析し、EMC/MD 法の妥当性を確認する。完全空乏化した p -Si、すなわちイオン化アクセプタ原子がランダムに存在する系に、少数キャリアである電子を導入し、低電界移動度のシミュレーションを行う。特に、電子による遮蔽効果が EMC/MD 法で正しく反映されるのかを注意深い検証を加える。次に、5.3 節では、EMC/MD 法を用い、MOSFET 反転層移動度のロールオフ現象 [19] を解析する。この現象は、遮蔽効果の電子濃度依存性が本質的役割を果たすものであり、シミュレータの妥当性を検証する上で、格好の練習問題であると考えた。5.4 節では、最後の解析対象として、ゲート poly-Si 空乏化によるリモート散乱効果を取り上げる。最近の MOSFET の急速な微細化によって、ゲート酸化膜厚は、いまや 2 nm を切り、ゲート poly-Si 電極中のイオン化不純物が、チャネル移動度に与える影響が懸念されている。最近報告された移動度に関する実験データ [5] との比較を通じ、シミュレーションの妥当性や問題点を議論する。

5.2 バルク p -Si 中の低電界電子移動度解析

5.2.1 シミュレーションの対象と方法

分子動力学部分の方法 — シミュレーション系と力の計算

本研究では、 n MOSFET のチャネル電子輸送解析を想定し、解析対象を全て p 型 Si 中の少数キャリア (= 電子) 輸送に限定した。したがって、シミュレーション系に導入する点電荷は、系内を動き回ることのできる電子、および固定されたイオン化アクセプタ原子 (陰イオン) となる。また、系の中性条件を満たすため、背景には一様連続な正電荷が分布しているとした。

今回、MD 計算の対象となる 2 種類の点電荷は、共に負に帯電しているが、従来報告されてきた EMC/MD 法は、ほとんどが電子と陽イオンを配置した系を対象にしたものであった。そこで、EMC/MD 法の本質的な問題として指摘されていたのが、イオンによる電子捕獲現象である [16]。これは、図 5.1 のように、陽イオンによって形成される $-\infty$ のポテンシャル井戸へ電子がフォノンを放出しながら無限に落ち込んでゆく問題で、古典的に電子軌道を追う EMC/MD 法ならではの困難といえる¹。現実世界においては、水素原子が安定であることから分かるように、量子効果 (不確定性原理) のおかげで電子のイオンへの無限の落ち込みは回避される。シミュレーション上

¹この時 MC シミュレーションの理論上な定常解は、電子と陽イオンのが全く同じ位置に静止する状況となるはずである。しかし、実際に数値実験を行うと、電子が陽イオンに接近して極めて大きな引力にさらされた際、運動方程式の数値積分誤差からエネルギー保存則を満たさない加速を受けてしまうことがある。すると、電子系の温度が意味なく上昇していく不可解なシミュレーション結果が得られる。筆者の経験によると、この誤差は MD 計算における積分タイムステップをいくらか細かくとったとしても避けることはできない。

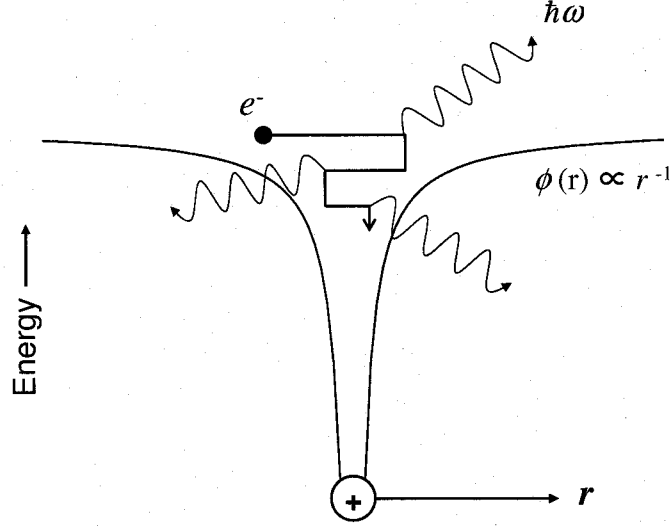


図 5.1: EMC/MD 法で問題となる陽イオンへの電子捕獲過程の概念図。陽イオンによって形成される $-\infty$ のポテンシャル井戸に、電子がフォノンを放出しながら無限に落ち込んでゆく。本研究では、電子-陰イオン系のみを解析対象としたため、この問題を回避することができた。

でこの問題を解決する手段として、これまでに Coulomb ポテンシャルの短波長成分をカットしてポテンシャルの無限の深みを除去する方策などが提案されている [20]。しかし、本研究の対象は、捕獲の起こらない電子-陰イオン系であり、我々は、イオンのポテンシャルとして通常の Coulomb ポテンシャル形:

$$\phi(r) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_{\text{Si}}} \frac{1}{r^2} \quad (5.1)$$

をそのまま使用した。ここで、 e は素電荷、 ϵ_{Si} は Si の静的誘電率、そして r はイオンからの距離である。

図 5.2 に、本節で解析するシミュレーション系の概念図を示す。全ての電子とイオンは、単位セルと呼ばれる立方体内部にランダムに配置し、系には 3 次元の周期的境界条件を課した。単位セルの壁を通過した電子は、それと対向する立方体の壁から現れることとなる。

粒子に働く力の計算の際には、3 次元周期的境界条件を考慮し、図 5.3 のように、単位セルがそのコピー (レプリカ) によって囲まれた状況を想定しなければならない。今、電子 i に働く力 $\mathbf{F}_i$ は次のように与えられる。

$$\mathbf{F}_i = \mathbf{F}_i^{\text{sr}} + \mathbf{F}_i^{\text{lr}} + \mathbf{F}_i^{\text{ext}} \quad (5.2)$$

ここで、 $\mathbf{F}_i^{\text{sr}}$ と $\mathbf{F}_i^{\text{lr}}$ は、粒子間力のそれぞれ短距離および長距離成分、また、 $\mathbf{F}_i^{\text{ext}}$ は外力を表している。注目している電子 i に働く短距離力は、電子 i を中心として定義されるカットオフ領域 R_i 内に存在している全ての点電荷からの反発 Coulomb 力を足し上げることによって次式から計算する。

$$\mathbf{F}_i^{\text{sr}} = \sum_{j \neq i, \mathbf{r}_j \in R_i} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_{\text{Si}}} \frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^3} \quad (5.3)$$

ここで、 $\mathbf{r}_i$ は i 番目の粒子の座標である。なお、電子 i に短距離力を及ぼしうる点電荷は、単位セル内部に限らず、単位セルに隣接するレプリカ内に存在する可能性もある。本研究では、カットオフ領域 R_i を次のように定義した。

$$|x - x_i| < \frac{L}{2}, |y - y_i| < \frac{L}{2}, |z - z_i| < \frac{L}{2} \quad (5.4)$$

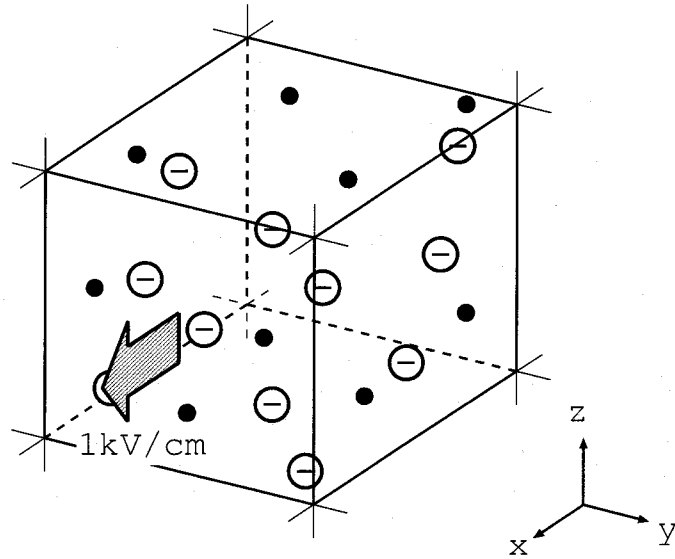


図 5.2: バルク Si 中の電子輸送解析のために想定したシミュレーション系の概念図. イオン化アクセプタ原子 (白丸) と電子 (黒丸) が, 一辺の長さ L の立方体内部にランダムに配置される. 系には 3 次元周期的境界条件を課した. 外場として 1 kV/cm の電界を印加し, 長時間にわたるシミュレーション間の電子の平均速度を計測し, 低電界移動度を求めた.

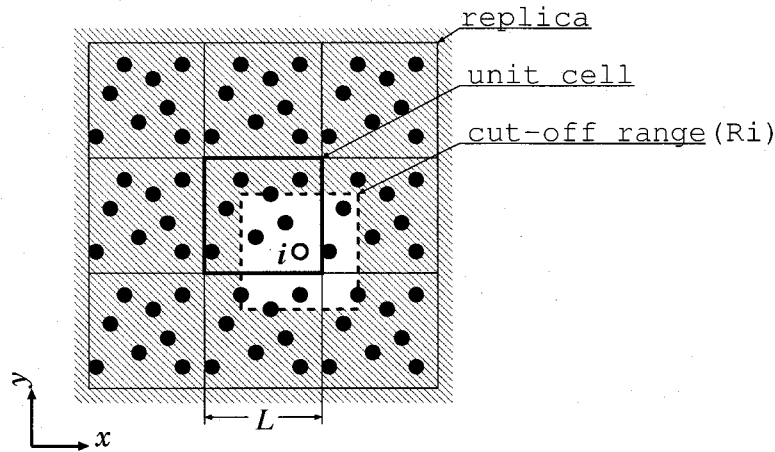


図 5.3: シミュレーション系を上から上から見たときの平面図. 電子 i (白丸) に働く力は, 電子 i の位置を中心にして定義されるカットオフ領域 R_i 内に存在する全ての点電荷からの Coulomb 力を合計することで計算する. 一方で, R_i の外に存在する電荷に関しては, それらが連続的かつ一様に分布していると仮定することで積分計算する.

ここで, L は単位セルの一辺の長さである.

逆自乗則に従う Coulomb 力は長距離力であり, 我々は $\mathbf{F}_i^{\text{lr}}$ の影響を無視することはできない. 本研究では, カットオフ領域 R_i の外にある電荷については, すべて連続的かつ一様に分布すると仮定し, 電子 i への影響を積分計算した. ただし, 今考えている系においては, 電子 i は常に R_i の中心に位置し, また外部電荷は, この中心位置に対して点対称に分布していることから, $\mathbf{F}_i^{\text{lr}} = 0$ となる.

分子動力学部分の方法 — 運動方程式の数値積分法

Newton の運動方程式の時間離散化には蛙飛び法 [21] を用いた。電子の運動を記述する運動方程式は、以下のように与えられる。

$$\frac{d\mathbf{k}}{dt} = \frac{\mathbf{F}}{\hbar} \quad (5.5)$$

$$\mathbf{v}_g(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial \mathbf{k}} \quad (5.6)$$

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \mathbf{v}_g \quad (5.7)$$

ここで、波数ベクトルの時間微分である式 (5.5) 左辺を時刻 $t + \Delta t/2$ と $t - \Delta t/2$ の間の差分式で近似する。

$$\frac{\mathbf{k}(t + \Delta t/2) - \mathbf{k}(t - \Delta t/2)}{\Delta t} = \frac{\mathbf{F}(t)}{\hbar} \quad (5.8)$$

この式を変形すると波数ベクトルを更新するための式が得られる。

$$\mathbf{k}(t + \Delta t/2) = \mathbf{k}(t - \Delta t/2) + \frac{\mathbf{F}(t)}{\hbar} \Delta t \quad (5.9)$$

次に、エネルギーバンド構造の情報から、式 (5.6) を用いて時刻 $t + \Delta t/2$ における電子群速度を求める。

$$\mathbf{v}_g(t + \Delta t/2) = \mathbf{v}_g(\mathbf{k}(t + \Delta t/2)) \quad (5.10)$$

式 (5.7) の位置ベクトルの時間微分を時刻 $t + \Delta t$ と t の間の差分式で与えると、

$$\frac{\mathbf{r}(t + \Delta t) - \mathbf{r}(t)}{\Delta t} = \mathbf{v}_g(t + \Delta t/2) \quad (5.11)$$

位置ベクトルを更新するための次式を得る。

$$\mathbf{r}(t + \Delta t) = \mathbf{r}(t) + \mathbf{v}_g(t + \Delta t/2) \Delta t \quad (5.12)$$

図 5.4 に蛙飛び法のアルゴリズムを図解する。時刻 t において、粒子に作用する力 F が与えられたとする。これを用いて、式 (5.9) により $t + \Delta t/2$ における波数ベクトル $\mathbf{k}$ が計算され、さらに同時刻の群速度 $\mathbf{v}_g$ が式 (5.10) より求まる。次にこの群速度から、式 (5.12) より時刻 $t + \Delta t$ で

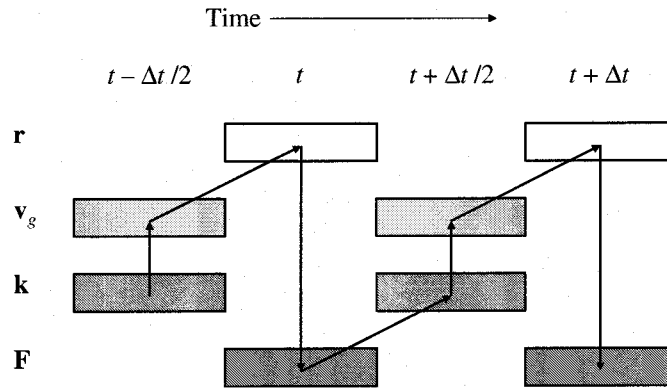


図 5.4: 蛙飛び法のアルゴリズム。

の位置ベクトル $\mathbf{r}$ が定まる．そして，この新たな粒子配置の下で，力 F を更新する．以上で 1 ステップの計算が完了するのである．

本研究では，タイムステップとして， $\Delta t = 10^{-17}$ sec を用いた．あまり大きなタイムステップを使用すると，上記数値積分の誤差によってエネルギー保存則が破れ，電子系の温度が意味なく上がる (例えば電界ゼロの定常状態で電子平均エネルギーが $3k_B T/2$ にならない) 状況となるので注意が必要である．

アンサンブルモンテカルロ部分のシミュレーション方法

今回開発したシミュレータのアンサンブルモンテカルロ部分，すなわち Si のエネルギーバンド構造と電子-フォノン散乱のモデル化に関しては，Jacoboni ら [22] によってまとめられた MC シミュレーションのための標準的電子輸送モデルを利用した．

電子エネルギー E と波数ベクトル (k_x, k_y, k_z) の関係は，Si 伝導帯の低エネルギー領域に存在する 6 個の X バレーを，回転楕円体で近似した非放物線型バンド構造モデル：

$$E(1 + \alpha E) = \frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{(k_x - k_{x0})^2}{m_x} + \frac{(k_y - k_{y0})^2}{m_y} + \frac{(k_z - k_{z0})^2}{m_z} \right] \quad (5.13)$$

で表した．ここで， m_x, m_y, m_z は各軸方向における電子有効質量であり，うち 2 方向については，短軸方向有効質量 $m_t = 0.19m_0$ ，残る 1 方向は長軸方向有効質量 $m_l = 0.98m_0$ を取る．また， (k_{x0}, k_{y0}, k_{z0}) は，バレー中心座標 (エネルギーが極小値をとる波数ベクトル) であり， k 空間の Δ 軸上で Γ 点から X 点に向かう 85 % の場所に位置する．具体的イメージを，図 5.5 に示した．なお， $\alpha = 0.5 \text{ eV}^{-1}$ は，高エネルギー領域においてバンド形状が放物線から外れる効果を反映するパラメータである．

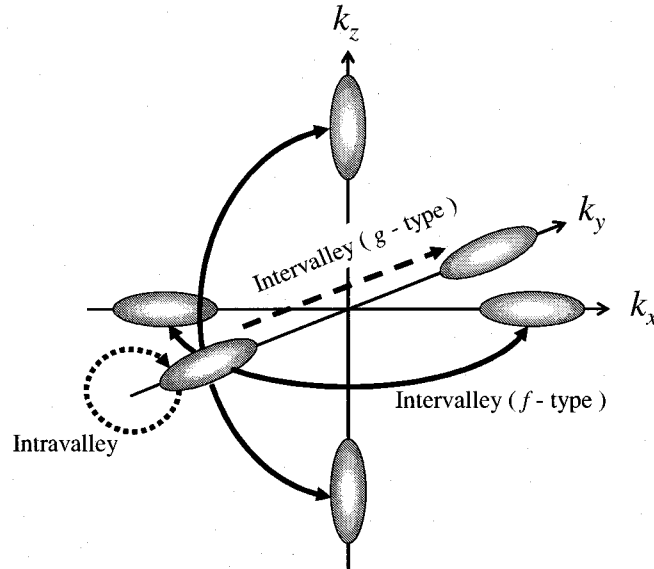


図 5.5: k 空間における Si 伝導帯の等エネルギー面の模式図．X 点近くにエネルギー極小値を持つ 6 つのバレーが存在する．個々のバレーでは有効質量に異方性があり，その等エネルギー面は回転楕円体形状を示す．モンテカルロシミュレーションでは，電子が散乱によって k 空間内部に存在する位置を変える方法を，バレー内散乱 (点線矢印)， f タイプのバレー間散乱 (実線矢印)， g タイプのバレー間散乱 (破線矢印) に分類する．

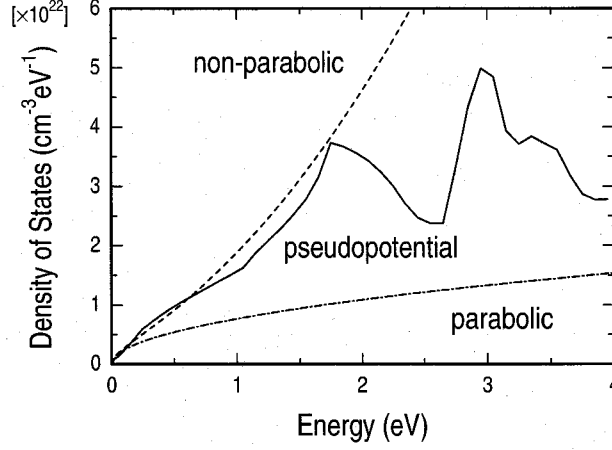


図 5.6: Si 伝導帯の状態密度の電子エネルギー依存性。破線が本研究で使用した非放物線型バンド構造モデル ($\alpha = 0.5 \text{ eV}^{-1}$) の状態密度である。比較のため、擬ポテンシャル法による現実的なバンド構造 (実線)、および $\alpha = 0$ とした放物線型モデル (一点鎖線) の状態密度を示した。

本バンドモデルに基づいて、伝導帯の状態密度 $D(E)$ を計算すると次式が導き出される。

$$D(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_d}{\hbar^2} \right)^{3/2} Z E^{1/2} (1 + 2\alpha E)(1 + \alpha E)^{1/2} \quad (5.14)$$

この結果には、スピン縮退による因子 2 を含めた。 $m_d = (m_l m_t^2)^{1/3}$ は状態密度有効質量、 Z は k 空間内に存在するバレーの総数であり、今の場合 $Z = 6$ である。 $D(E)$ の計算結果を図 5.6 に示す。式 (5.13) は、簡単な式だが、非放物線性 α の導入により、 $E < 1.7 \text{ eV}$ の範囲の実際の状態密度を十分良く再現していることが分かる。本研究では、熱エネルギー程度 ($3k_B T/2 \simeq 39 \text{ meV}$) の電子による低電界移動度のシミュレーションにのみ興味があるので、非放物線モデルで、十分 Si 伝導帯を表現していると言える。

モンテカルロ法で確率的に取り扱う電子散乱過程としては、バレー内音響フォノン散乱とバレー間の音響および光学フォノン散乱を考慮した。バレー内音響フォノン散乱確率 P_{ac} は、弾性散乱近似、エネルギー等分配近似を仮定すると、電子エネルギー E の関数として次のように与えられる。

$$P_{ac}(E) = \frac{2^{1/2} m_d^{3/2} k_B T \Xi^2}{\pi \hbar^4 u^2 \rho} E^{1/2} (1 + 2\alpha E)(1 + \alpha E)^{1/2} \quad (5.15)$$

ここで、 Ξ は変形ポテンシャル、 ρ は Si の密度である。また、縦波の音速 u_l と横波の音速 u_t を平均した音速 $u = (2u_t + u_l)/3$ を用いた。今回 Ξ には散乱角依存性などを考慮せず定数とし、散乱後の終状態波数ベクトルは、散乱前と同一のバレー内かつ同一の等エネルギー面上から一様にランダム選択した。バレー間フォノン散乱は、散乱前後のバレーの組み合わせとして、図 5.5 に示すような g タイプおよび f タイプの 2 種類に分類される。さらに、フォノンの分枝モードとして、横波音響フォノン (TA)、縦波音響フォノン (LA)、縦波光学フォノン (LO) の 3 種類を今回考慮した。以上から、合計 6 種類のバレー間フォノンが散乱過程として加わる。散乱確率 $P_i(E)$ は一般的に以下の式で与えられる。

$$P_i(E) = \frac{(D_i K)^2 m_d^{3/2} Z_{f,i}}{2^{1/2} \pi \rho \hbar^3 \omega_i} \left(N_i + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right)$$

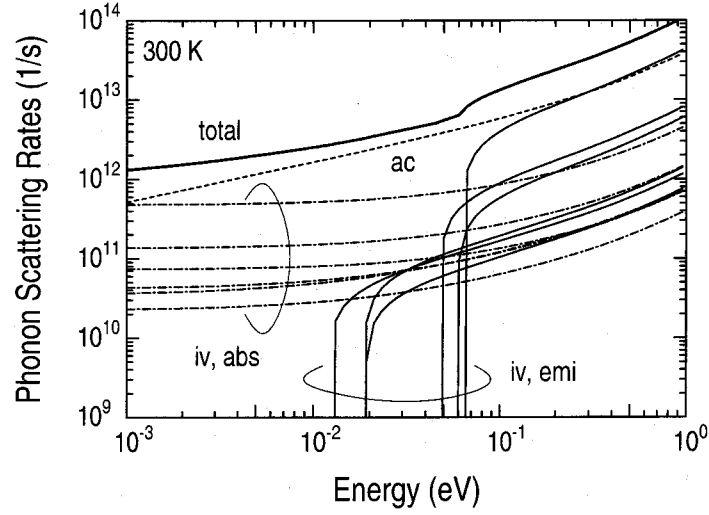


図 5.7: 室温におけるフォノン散乱確率の電子エネルギー依存性. 音響フォノン散乱 (ac), バレー間フォノン散乱の吸収 (iv,abs) および放出 (iv,emi) に対する散乱確率をプロットした. また, 全フォノン散乱確率 (total) を太線で示した.

$$\times (E \mp \hbar\omega_i)^{1/2} [1 + 2\alpha(E \mp \hbar\omega_i)] [1 + \alpha(E \mp \hbar\omega_i)]^{1/2} \quad (5.16)$$

ここで, $(D_t K)_i$ と ω_i はそれぞれバレー間散乱に関与するフォノンの変形ポテンシャルとフォノン振動数, N_i はフォノン占有数で $N_i = [\exp(\hbar\omega_i/k_B T) - 1]^{-1}$ で与えられる. $Z_{f,i}$ は散乱先となり得るバレーの個数, 複号は, 上がフォノンの放出, 下が吸収に対応する. $(D_t K)_i$, ω_i については, バレー組み合わせとフォノン分枝のみに依存する定数とし, 散乱角依存性などは考慮しなかった. 散乱後の終状態波数ベクトルは, 散乱先のバレー内部において, フォノン吸収散乱については $E_f = E_i + \hbar\omega_i$, 放出については $E_f = E_i - \hbar\omega_i$ の等エネルギー面上で一様にランダム選択した.

Si 結晶, エネルギーバンド構造, フォノン散乱に関わるパラメータの具体的な数値を表 5.1 と表 5.2 に示す.

本研究では, ほとんど Jacoboni らの文献 [22] に記載されたそのまの値を用いた. ただし, Ξ についてのみ, フォノン散乱により律速される移動度 μ_{ph} のシミュレーション結果が, 室温において実験値と同じ値 $1,400 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ を示すよう調整を加えた.

表 5.1: Si のバルク結晶とそのバンド構造に関する定数値.

ρ	u_l	u_t	m_l	m_t	α	Ξ
2.33 g/cm^3	$9.0 \times 10^5 \text{ cm/sec}$	$5.3 \times 10^5 \text{ cm/sec}$	$0.98m_0$	$0.19m_0$	0.5 eV^{-1}	6.05 eV

表 5.2: バレー間フォノン散乱に関する定数値。横波音響フォノン (TA), 縦波音響フォノン (LA), 縦波光学フォノン (LO) についてそれぞれ g タイプ, f タイプの散乱を考える。なお, θ はフォノン振動数 ω を温度に換算した量で $\theta = \hbar\omega/k_B$ の関係にある。

	g_{TA}	g_{LA}	g_{LO}	f_{TA}	f_{LA}	f_{LO}
θ (K)	140	215	720	220	550	685
$D_t K$ (10^8 eV/cm)	0.5	0.8	11.0	0.3	2.0	2.0
Z_f	1	1	1	4	4	4

低電界電子移動度のシミュレーション方法

Si 結晶の 3 つの主軸をそれぞれ x , y , z 方向に合わせ, 外場として $F^{\text{ext}} = 1$ kV/cm の電界を x 軸方向に印加した。電子集団の運動の時間発展をシミュレーションし, 定常状態での電子の集団平均速度をさらに時間的に平均して低電界移動度を求めた。

$$\mu = \frac{1}{F^{\text{ext}}} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{1}{T} (\mathbf{r}_i(t_0 + T) - \mathbf{r}_i(t_0)) \cdot \mathbf{i}_x \quad (5.17)$$

ここで, N はシミュレーション粒子数, $\mathbf{i}_x$ は x 方向の単位ベクトルである。シミュレーション時間 T は, 十分収束が得られるまで十分長く取った。また, シミュレーション開始から時刻 t_0 までの過渡状態のシミュレーション結果は, 初期条件の影響を排除するため考慮に入れなかった。典型例をあげると, $N = 400$ 個の電子に対し, $t_0 = 1$ ps とし, $T = 30$ ps 以上のシミュレーションを行った。

5.2.2 シミュレーション結果と考察

バルク電子移動度の電子濃度依存性

図 5.8 は, p -Si 中の電子移動度を電子濃度 n に対して求めたシミュレーション結果である。アクセプタイオン濃度 N_A が, 10^{18} cm^{-3} の場合を考慮した。シミュレーションに用いた単位セルの大きさは, $L = 100 \text{ nm}$ である。系に導入したイオンの個数は 10^3 個に固定し, 電子の個数を 10 個から 10^3 個まで振ることで, 移動度の電子濃度依存性を求めた。電子濃度の増加と共に移動度が増加する結果が得られている。なお, 図中には, Brooks-Herring (BH) 理論によって予測される電子移動度 [8] を参考のためプロットした²。ここで, 移動度の解析的計算においては, Si 中の電子有効質量を等方的な値で近似し, $m^* = 0.32m_0$ [10] を使用した (ここで, m_0 は, 自由電子の静止質量である)。マッティーセンの法則

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{\mu_{\text{ph}}} + \frac{1}{\mu_{\text{BH}}} \quad (5.18)$$

を用いて, フォノン散乱とイオン化不純物散乱によって律速される電子移動度を合成した。BH 理論によれば, 移動度のキャリア濃度依存性は, イオン化不純物の静電遮蔽効果を考えることで説明される。すなわち, キャリア濃度が高いほど, イオン化不純物は強く遮蔽され, キャリアに対する散乱断面積が減少すると考えられる。今回, EMC/MD シミュレーションにおいて, 移動度に電子濃度依存性が見られたことは, 同手法においても, 遮蔽効果が働いていることを示唆する結果であるといえる。

²BH 理論による不純物散乱移動度の解析的導出については, 付録 B に詳しい解説を示した。

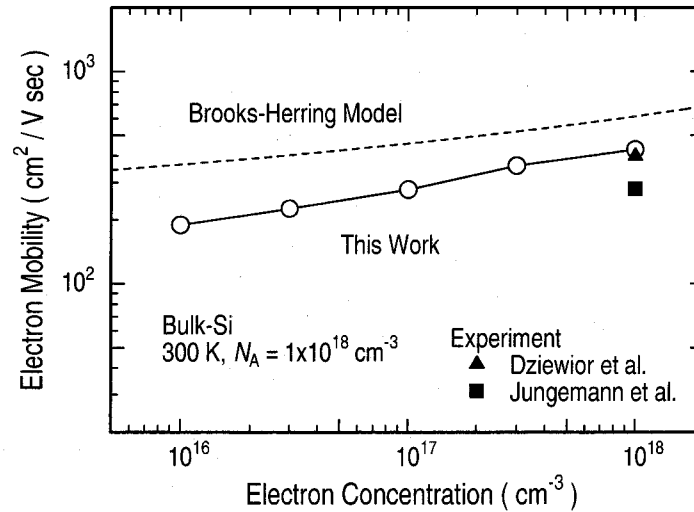


図 5.8: バルク p 型 Si 中の電子移動度の電子濃度依存性. イオン化不純物 (アクセプタイオン) 濃度は, 10^{18} cm^{-3} の場合を考えた. 白丸が EMC/MD 法によるシミュレーション結果を示す. 破線は理論から解析的に計算した移動度で, 式 (B.9) に示す Brooks-Herring 理論によるイオン化不純物散乱移動度とフォノン散乱移動度 μ_{ph} を Matthiessen 則にしたがって合成することで求めた. 黒印は, p 型 Si 中の少数キャリア移動度測定から得られた実験値 [23, 24] である.

電子による陰イオンの静電遮蔽効果の検証

ここでは, EMC/MD 法における静電遮蔽効果を, 電子濃度およびポテンシャル分布の時間平均値を解析することにより検証する.

図 5.9 に, シミュレーション系内で電子が感ずるポテンシャルエネルギーの空間分布をプロットした. ある z = 一定のスライス面上での分布を見ている. 図 5.9 (a) は, 濃度 10^{18} cm^{-3} でランダムに分布するアクセプタイオンのみからのポテンシャルである. イオンは負に帯電しているので, 各イオンの近傍では電子に対して反発力が働き, 急激にポテンシャルが高くなっている. それとは別に, 空間的变化はなだらかなのであるが, 緩やかなうねり成分があることも見てとれる. これは, 長距離力である Coulomb 力の長波長成分が合成され現れたポテンシャル揺らぎである. この系に電子を導入し, ある瞬間におけるポテンシャル分布を示したものが, 図 5.9 (b) である. この場合は, ポテンシャル分布という意味ではただ単にイオン化不純物濃度が 2 倍となっただけで, 図 5.9 (a) で見られた性質のポテンシャル変化がより顕著になっている. ただ, 電子の導入により追加されたポテンシャル揺らぎは, 直接的には電子移動度に影響を与えないものと考えられる. なぜならば, 電子どうしの衝突では, 電子の運動量の和は保存され, それゆえ電子集団の平均速度, あるいは移動度は不変となるからである. 図 5.9 (c) は, 実際に 10 ps の間, 電子集団を EMC/MD 法により運動させ, その間のポテンシャル分布の時間平均を取ったものである. 図 5.9 (a) と見比べると, 陰イオン近傍のポテンシャルの「つの」に変化はない. しかし, 長波長のうねり成分が平坦化されていることが分かる.

図 5.10 は, 電子濃度の空間分布のシミュレーション結果である. シミュレーション系内部における電子集団の動きを長時間追跡し, 電子が存在しやすい位置を調べた. 具体的には, シミュレーション空間を細かなメッシュに分割し, 各格子に含まれる電子の個数を時間的に積算, それを時間

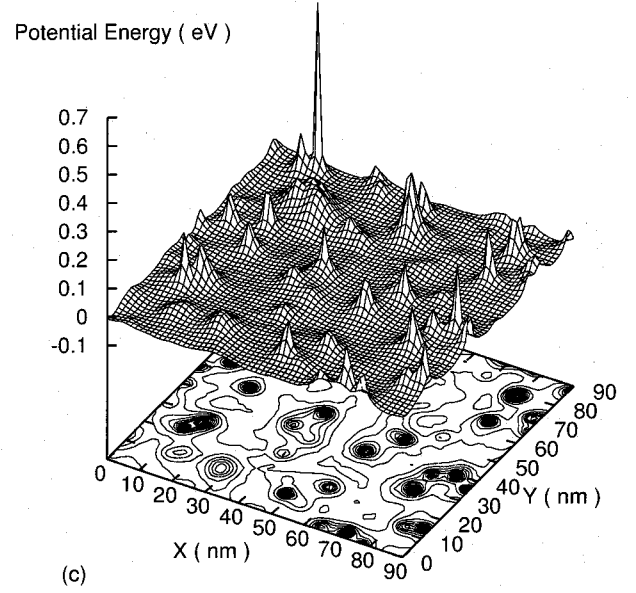
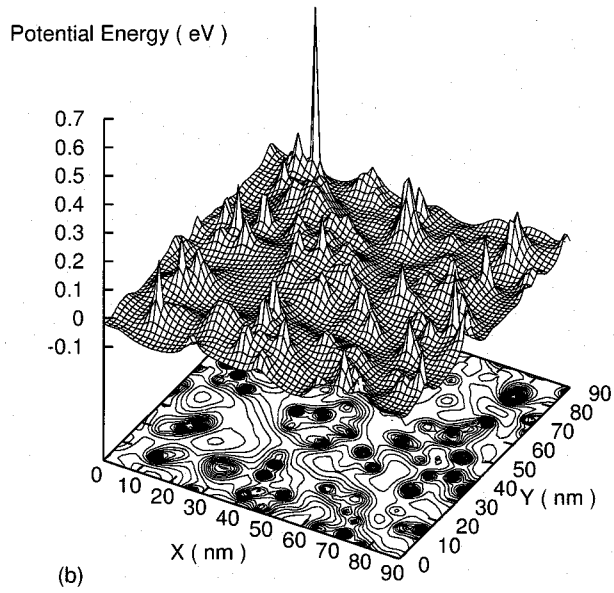
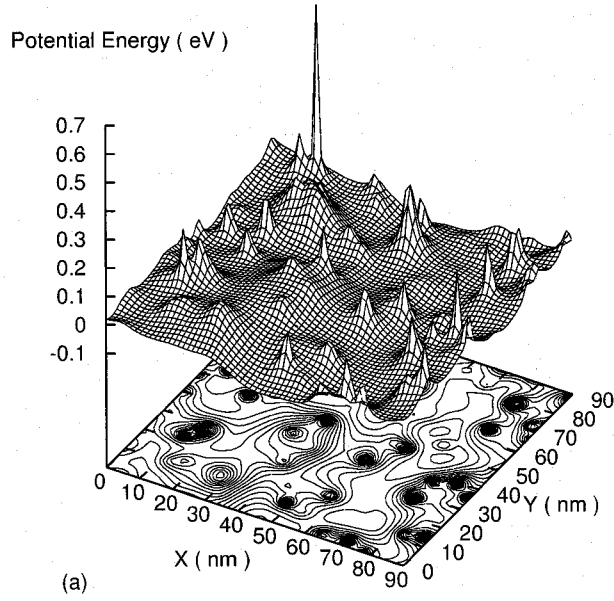


図 5.9: シミュレーション系の $z = \text{一定}$ の面上でのポテンシャルエネルギー分布. (a) イオン化不純物のみからのポテンシャルエネルギー ($N_A = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$). (b) イオン化不純物および電子からのポテンシャルエネルギーの瞬間的なスナップショット ($N_A = n = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$). (c) イオン化不純物および電子からのポテンシャルエネルギーの変化を 10 ps の間積分し、時間平均をとったもの.

平均電子濃度分布として図示した。電子濃度分布には一様でない分布が良く現れており、電子は平均的に陰イオンから離れて存在していることがわかる。このことは、陰イオンが正電荷の衣をまとっていることと等価であり、陰イオンからのポテンシャルの影響が遠方まで届かない、すなわち静電遮蔽効果を表している。

最後に、静電遮蔽の影響をポテンシャルの空間的分布に対する Fourier 解析を行うことで定量的に評価してみよう。シミュレーション系内において電子が感ずるポテンシャルエネルギー $\phi_{\text{sim}}(\mathbf{r})$ に対し、パワースペクトル密度 (PSD) を次のように定義する。

$$S(\mathbf{q}) = \frac{1}{L^3} \left| \int_0^L dx \int_0^L dy \int_0^L dz \phi_{\text{sim}}(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \right|^2 \quad (5.19)$$

実際には、シミュレーション系を $64 \times 64 \times 64$ の格子に分割し、各格子点におけるポテンシャルエネルギー値のデータを高速 Fourier 変換 (FFT) [25] にかけることで、PSD を算出した。

一方で、散乱ポテンシャルの Fourier 変換を解析的に見積もることも可能である。まず、イオン単体のポテンシャルエネルギーとして、遮蔽された Coulomb ポテンシャル

$$\phi_{\text{sc}}(\mathbf{r}) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_{\text{Si}}} \frac{1}{r} e^{-q_s r} \quad (5.20)$$

を仮定する。ここで、指数関数因子 $e^{-q_s r}$ は、イオン化不純物の周りに存在する自由キャリアが再分布することによって、イオンのポテンシャルの影響が遠方まで及ばなくなる効果 (= 遮蔽効果) を表している。遮蔽パラメータ q_s は、古典統計に従う電子気体を想定した Debye-Hückel モデル [26] によると、電子濃度 n の関数として次のように与えられる。

$$q_s = \sqrt{\frac{e^2 n}{\epsilon_{\text{Si}} k_B T}} \quad (5.21)$$

これらイオンを空間的にランダムに配置したときの、ポテンシャルエネルギーの Fourier 変換形を計算すると

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{q}) &= \frac{1}{\sqrt{L^3}} \int d\mathbf{r}^3 e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \sum_{\alpha} \phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{\alpha}) \\ &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_{\text{Si}}\sqrt{L^3}} \sum_{\alpha} \int d^3 r \frac{e^{-q_s |\mathbf{r} - \mathbf{R}_{\alpha}|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_{\alpha}|} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \\ &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_{\text{Si}}\sqrt{L^3}} \sum_{\alpha} \int d^3 r' \frac{e^{-q_s |\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}'|} e^{-i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}' + \mathbf{R}_{\alpha})} \\ &= \frac{e^2}{i\epsilon_{\text{Si}}\sqrt{L^3}} \frac{1}{q^2 + q_s^2} \sum_{\alpha} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_{\alpha}} \end{aligned} \quad (5.22)$$

なる関係が得られる。上式の中に現れた因子 $\rho_{\mathbf{q}} = \sum_{\alpha} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_{\alpha}}$ に対して、不純物原子間の位置には相関が無く、完全にランダムな分布をすると仮定し、近似を施す [27]。不純物原子の存在位置が異なる多数の Si 結晶の集合を想定し、各々に対する $\rho_{\mathbf{q}}$ の値の平均を考える。この平均操作を $\langle \rangle$ の記号で表す。Si 結晶の j 番目の格子点に注目し、これに対し ξ_j の変数を導入する。もし、 j 番目の格子点の不純物で占められていると $\xi_j = 1$ 、そうでないときは $\xi_j = 0$ とする。この変数を用いると

$$\rho_{\mathbf{q}} = \sum_j \xi_j e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_j} \quad (5.23)$$

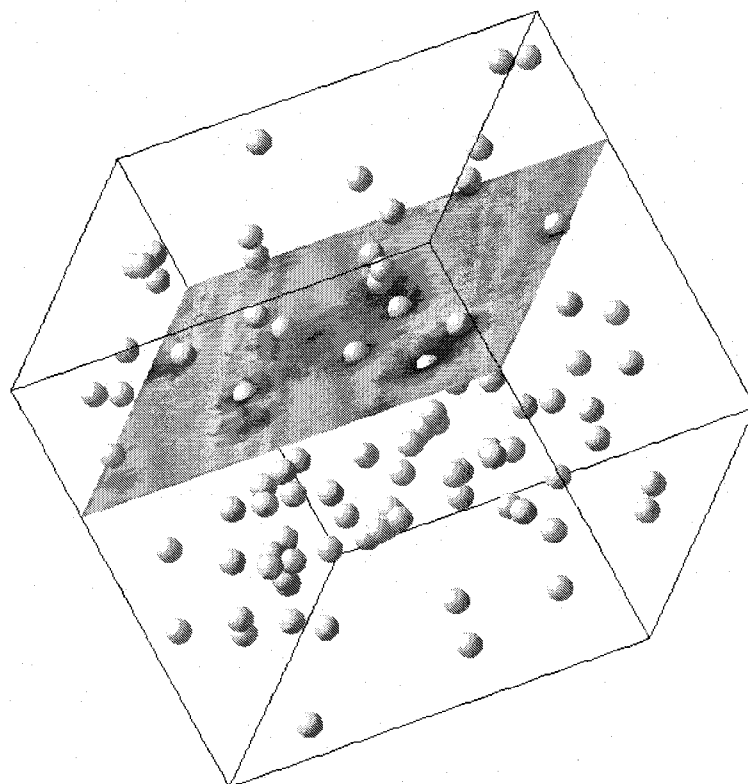


図 5.10: シミュレーション系内部における電子集団の動きを長時間追跡し、電子が存在しやすい位置を調べた結果。空間を細かなメッシュに分割し、各微小領域に含まれる電子の個数をシミュレーション時間で積算、それを時間平均電子濃度分布とした。ここでは、スライス面上の電子濃度を白黒の濃淡で示しており、暗い部分ほど電子濃度が薄く電子が存在しにくい領域に対応する。白球は負に帯電したアクセプトイオン原子の位置を表している。イオンの周りには暗い影が見え、電子濃度が小さくなっている様子が分かる。ここで用いたシミュレーション系 (立方体) の 1 辺の長さは 46 nm, イオンと電子の濃度は共に 10^{18} cm^{-3} である。

と書ける．上式から

$$\langle |\rho_{\mathbf{q}}|^2 \rangle = \langle \rho_{\mathbf{q}} \rho_{\mathbf{q}}^* \rangle = \sum_{jk} \langle \xi_j \xi_k \rangle e^{-i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_k)} \quad (5.24)$$

となる．格子点が不純物で占められている確率を p とおくと， ξ に対する平均は

$$\langle \xi_j \rangle = \langle \xi_j^2 \rangle = p, \quad \langle \xi_j \xi_k \rangle = p^2 \quad (j \neq k) \quad (5.25)$$

の性質をもつから，結局

$$\langle |\rho_{\mathbf{q}}|^2 \rangle = p \sum_j 1 + p^2 \sum_{j \neq k} e^{-i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_k)} \quad (5.26)$$

$$\simeq p \sum_j 1 = NL^3 \quad (5.27)$$

と表される．ここで， $p \ll 1$ を仮定し， p に関する 2 次の項を無視した．なおこの項は，系の大きさを広げて不純物数を増やした極限においても，指数関数部が互いに打ち消しあうため 0 に収束すると考えられる．式 (5.22) にこの結果を代入すると，最終的に

$$\begin{aligned} S(\mathbf{q}) &= \frac{e^4}{\epsilon_{\text{Si}}^2 L^3} \frac{1}{(q^2 + q_s^2)^2} |\rho_{\mathbf{q}}|^2 \\ &\simeq \frac{e^4}{\epsilon_{\text{Si}}^2 L^3} \frac{1}{(q^2 + q_s^2)^2} \langle |\rho_{\mathbf{q}}|^2 \rangle = \frac{e^4 N}{\epsilon_{\text{Si}}^2 (q^2 + q_s^2)^2} \end{aligned} \quad (5.28)$$

という関係が得られる．

シミュレーション系のポテンシャル分布に FFT を施し，PSD を求めた結果を図 5.11 に示す．ここでは，イオンのみからのポテンシャルエネルギー分布 (図 5.9a 参照) に対し PSD をもとめた $S_{\text{ion}}(q)$ ，およびイオンと電子によるポテンシャルエネルギー時間平均した分布 (図 5.9c 参照) に対する $S_{\text{ion+e}}(q)$ とを比較している．Coulomb ポテンシャルの性質を反映して， $S_{\text{ion}}(q)$ は，ほぼ q^{-4} に比例して減少している．しかしながら，長波長領域の $S_{\text{ion+e}}(q)$ は，遮蔽効果によって減衰している様子が分かる．この減衰は，波数 $q < q_s$ の領域で特に顕著である．なお，この図では，式 (5.28) により計算した PSD もあわせてプロットしている．細かなノイズを除き，シミュレーション結果と一致した傾向が見られる．なお，ノイズは，式 (5.27) で無視した，式 (5.26) 第 2 項の影響と考えられる．図 5.12 は，遮蔽効果が加わる前後の PSD の比，すなわち $[S_{\text{ion}}(q)/S_{\text{ion+e}}(q)]^{1/2}$ を q の関数としてプロットした結果である．この結果は，低周波領域の誘電関数の理論式 [26]:

$$\epsilon(q, \omega \rightarrow 0) = 1 + \frac{q_s^2}{q^2} \quad (5.29)$$

とよく一致している．ここで， ω はポテンシャルの時間変化に対する周波数である．

以上で見たように，EMC/MD 法において，時間的に平均化したポテンシャルエネルギーに対する遮蔽効果，すなわち静電遮蔽効果は，実際に作用していることが分かった．

シミュレーション系の大きさの影響

ここではまず，カットオフ近似について考察する．本研究において，我々は粒子に働く力を見積もる際，その粒子を中心としたカットオフ領域を設定し，領域内部に存在する全ての点電荷からの Coulomb 力を足し上げる一方で，外部の電荷の影響についてはそれが一様・連続な分布であると見なすことで積分計算を実行した．たとえば，一般的な分子動力学法や粒子シミュレーションの

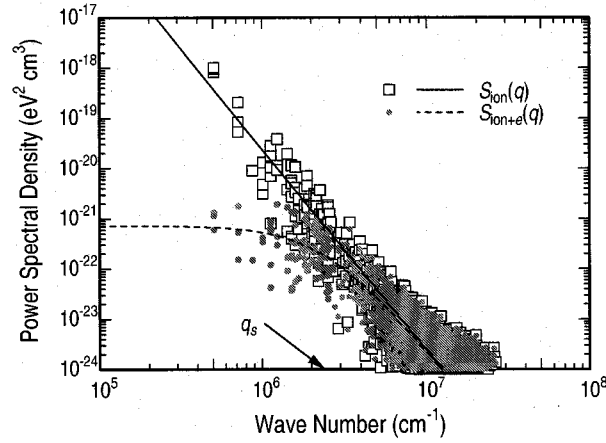


図 5.11: シミュレーション系内のポテンシャル分布のパワースペクトル密度. 固定されたイオン化不純物のみからのポテンシャル (白四角) と, さらに運動している電子からの影響を足し合わせ時間平均を取ったポテンシャル分布 (黒点) に対するパワースペクトル密度を比較した. イオンと電子の濃度はともに 10^{18} cm^{-3} , 格子温度は 300 K である. また, シミュレーション系として 1 辺の大きさ 124 nm の立方体を想定した. Debye-Hückel モデルから予測される遮蔽パラメータ q_s を図中に矢印で示している. さらに, 解析式から予想されるパワースペクトル密度を, 遮蔽効果を考慮しないとき (実線), 考慮したとき (破線) に対してプロットした.

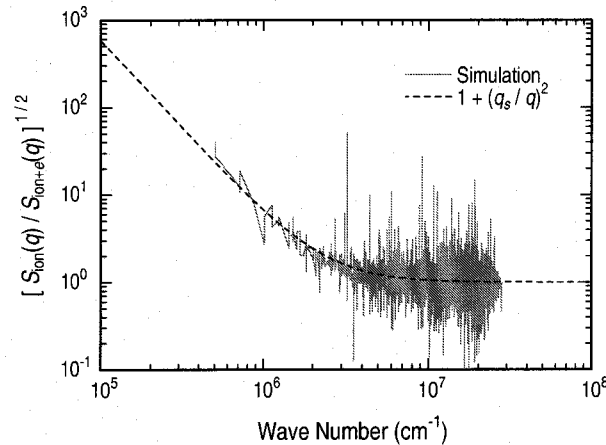


図 5.12: 遮蔽効果の有無によるパワースペクトル密度の比 $[S_{\text{ion}}(q)/S_{\text{ion+e}}(q)]^{1/2}$ の q 依存性. 破線は, 静的誘電関数の解析式モデルを示している.

分野では, これと類似した手法として particle-particle-particle-mesh (P³M) アルゴリズムがしばしば利用されている [15, 21]. この手法では, カットオフ領域内に存在する粒子については粒子間の 2 体力を直接計算し, また, 領域外に存在する電荷からの長距離力については空間をメッシュ分割して各格子点に電荷分布を割り当て, Poisson 方程式を数値的に解くことによって力を得る. 今回我々が使用した近似は, カットオフ領域外のメッシュに対しすべて等しい電荷量を割り当てた P³M 法に相当する. 本研究で解析対象とした系はすべて不純物イオンを空間的にランダムに配置

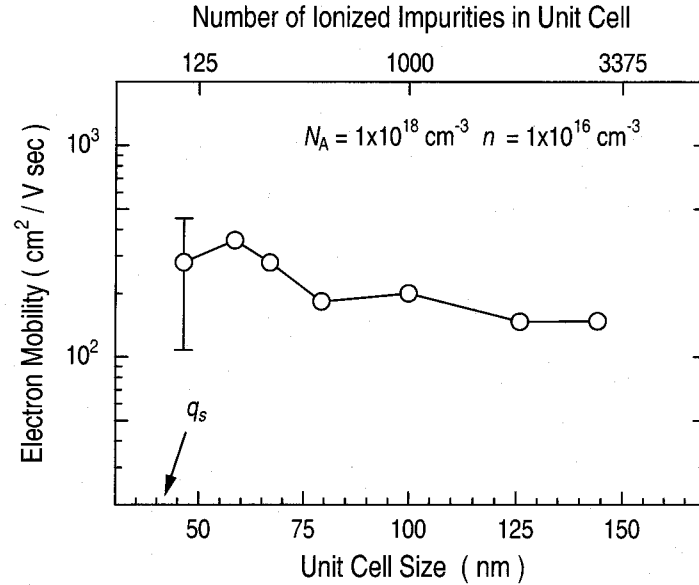


図 5.13: EMC/MD シミュレーションで得られた低電界電子移動度のユニットセルサイズ依存性. イオン化不純物濃度 10^{18} cm^{-3} , 電子濃度 10^{16} cm^{-3} の場合を考えた. シミュレーションで用いたイオン化不純物数は, 100 個から 3,000 個の間で変化させた (電子数はその 100 分の 1 である). 最小ユニットセル ($L = 46 \text{ nm}$) の場合については, イオン化不純物の配置が異なる 4 種類の系を用意し, 4 とおりのシミュレーションを実施した. その際得られた移動度の平均値, 最大・最小値を丸印とエラーバーで表している. 図中の矢印は遮蔽距離を示す.

したものとはいえ, 厳密には各メッシュ点の電荷値は一定値にはならないが, 自由キャリアによる遮蔽効果を考慮すれば, 妥当な近似ではないかと考えている. すなわち, カットオフ領域の大きさを遮蔽距離 q_s^{-1} に比べ十分大きくとっておけば, カットオフ領域外の遠くのイオンは自由キャリアによって遮蔽されるため, 電子に力を及ぼさない. ただし, これはあくまで静電ポテンシャル, すなわち時間平均ポテンシャルについてのみにあることである. 最近, 高濃度キャリアによるプラズマ振動がキャリア輸送特性に大きな影響を与えるとの指摘もなされている [28]. この効果の取り込みには, P^3M の導入が必要であろう.

図 5.13 は, さまざまなユニットセルサイズ L を設定して EMC/MD シミュレーションを実施し, 各々の移動度を比較した結果である. イオンと電子の濃度は全て同じ条件 ($N_A = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, $n = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$) とし, 系のサイズのみを変化させた. L の値が小さい場合のシミュレーション結果には, 移動度に L 依存性が見受けられる. 電子濃度の関数として与えられる遮蔽距離 q_s^{-1} は, 今の場合 41 nm である. カットオフ距離 $L/2$ を, 41 nm より大きくとらないと, カットオフ領域外の点電荷の影響が無視しえないため, シミュレーションに誤差が生ずる. そのほか, イオンの配置によって, 系のポテンシャル分布が異なり, それが移動度の差として現れることも考えられる. これは, 式 (5.26) における第 2 項の効果ともいえる. 我々は, 乱数列を変えることで, 個々のイオン化不純物の位置が異なった系を用意し, それぞれに対する電子移動度の比較を行った. 図 5.13 では, 最小の L を用いた場合の結果に対し, イオン配置による移動度ばらつきの範囲を示しているが, たしかに, イオン配置によって移動度に差が現れていることが分かる. ただし, この影響は系

サイズの増加とともに平均化されると考えられ、図 5.13 においても、 L が大きくなるにつれ、移動度が一定値に収束していく傾向が見られる。このように、EMC/MD 法において移動度を評価する際は、結果の系サイズ依存性に注意が必要である。ただ、逆に現在、現実的なデバイスのサイズが縮小され、素子内に含まれる不純物数が減少していることを考えると、素子ごとの移動度ばらつきが、集積回路の特性に悪影響を及ぼす可能性が十分に懸念される。従来のデバイスシミュレーションでは、不純物散乱移動度は、まず無限に広がったバルク系で評価し、そこから抽出したデータを利用してきた。したがって、可算個不純物イオンの配置に対する移動度ばらつきの解析には、対応することが困難である。EMC/MD 法が、この問題に対する解法の 1 つとなることが期待される。

BH 理論との結果の相違に関する考察

図 5.8 に示した移動度のキャリア濃度依存性では、EMC/MD シミュレーションと BH モデルの結果は定性的には一致したものの、定量的にはファクタで 1.5~2 倍の差異が見られた。また、実験値 [23, 24] との比較という観点では、EMC/MD 法の法がより良い一致を示した。本節の最後では、この両者の計算法の違いについて考察を行う。

BH モデルでは、不純物ポテンシャルを静電誘電関数、式 (5.29)、を用いて遮蔽し、1 次摂動近似によって遷移確率を計算する (詳しくは付録 B を参照)。今回の EMC/MD シミュレーションでは、先に詳しく解析したように、静電遮蔽効果は正しく取り込まれていると考えられる。図 5.8 の計算で用いた系の大きさは全て $L = 100 \text{ nm}$ と設定した。Debye-Hückel モデルによる遮蔽距離 q_s^{-1} は、最長となる $n = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ の場合でもせいぜい 41 nm なので、すべてカットオフ距離 $L/2 = 50 \text{ nm}$ 以内に収まっている。また、図 5.13 で見たように、 L の大きさを広げたシミュレーションを試してみても、移動度の結果はほとんど変わらない (2, 3 割減少しているのもむしろ BH 理論の結果からさらに外れる方向である)。

付録 B で導出した BH 理論によるイオン化不純物散乱確率は、次式の形に書き表すことができる。

$$\frac{1}{\tau_{\text{imp}}(E)} = N_A v_g \sigma_T \quad (5.30)$$

ここで、 σ_T は、1 個のイオン化不純物に対する散乱断面積で、

$$\sigma_T = \frac{e^4 m_d^2}{8\pi \epsilon_{\text{Si}}^2 (\hbar k)^4} (1 + \alpha E)^{-1/2} (1 + 2\alpha E)^2 \left[\log(1 + b) - \frac{b}{1 + b} \right] \quad (5.31)$$

と与えられる。式 (5.30) の意味することは、BH 理論では個々のイオン化不純物との衝突は独立に起こり、個々のイオン間には重なりがないということである。今回シミュレーションした条件に関して、この仮定の妥当性を調べた結果を図 5.14 に示す。図 5.8 と同じ条件のもと、遮蔽距離 q_s^{-1} を半径とする球内に含まれるイオンの平均数を計算した。電子濃度が約 $4 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ 以下の領域で、平均数は 1 を超えているが、これは、イオンの影響力が及ぶ距離内に他のイオンが存在していることを意味する。すなわち、電子が同時に複数のイオンからの力を受けて散乱される多重イオン散乱が起こっていて、BH モデルの仮定が破綻していることを示唆している。Kay らは、この効果を補正した計算を行い、BH モデルよりも移動度が減少することを示した [29]。EMC/MD 法では、多重散乱効果が自動的に入るため、BH モデルと比べ、より低い移動度を示したものと考えられる。なお、BH 理論では、散乱確率の計算に量子力学を用いているが、1 次摂動近似を用いるとその散乱断面積は、古典的運動方程式から導き出される Rutherford 散乱公式と一致することが知られている [30]。

一方、電子濃度の高い領域においても EMC/MD 法は、BH モデルの結果より小さな移動度を示している。以前 Joshi らは、EMC/MD 法を用いて GaAs のバルク電子移動度を計算した [13]。彼

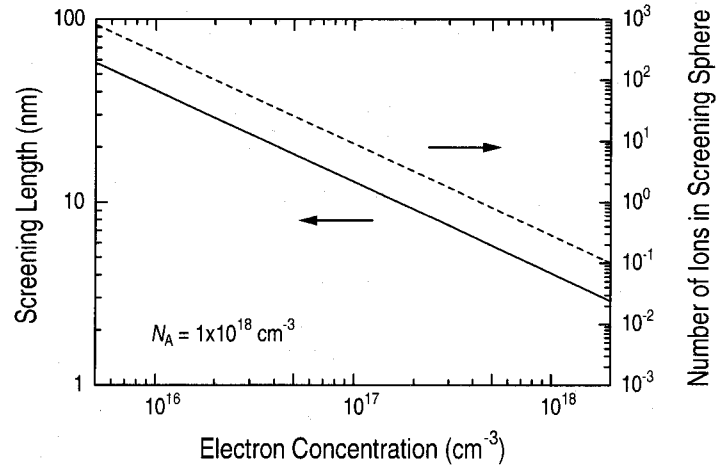


図 5.14: 遮蔽距離 q_s^{-1} の電子濃度依存性 (実線), および q_s^{-1} を半径とする球内に含まれるイオンの平均数 (破線). ただし, イオン濃度 $N_A = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ とした.

らは, イオン化ドナー不純物と多数キャリアである電子の濃度が等しい条件においてシミュレーションを行い, 我々の結果と同じく BH モデルよりも小さな移動度が得られることを報告した. また, その値は BH モデルでは再現の難しかった実験値と非常に良い一致を示した. 彼らは, BH モデルでは取り入れられていない動的遮蔽効果などをその理由としてあげている. また, 電子-電子散乱は, 運動量が散乱前後で保存するため, 移動度に直接影響を及ぼさないが, 分布関数の形状を変化させることによって, 間接的にフォノン散乱移動度やイオン化不純物散乱移動度に影響する (移動度が減少する方向 [10]) ことも考えられる. これらの複合的效果は, 全て EMC/MD 法では自動的に考慮されるため, より正確なシミュレーションが可能であると考えられる.

5.3 反転層電子移動度のロールオフ現象の解析

5.3.1 シミュレーション対象

図 5.15 は, Takagi ら [19] による反転層電子移動度の実験結果である. 基板原子濃度 N_A の異なる n MOSFET 中の反転層電子移動度を実効垂直電界:

$$E_{\text{eff}} = \frac{e}{\epsilon_{\text{Si}}} (N_d + \eta n_s) \quad (5.32)$$

を横軸として, まとめてプロットしている. ここで, n_s , N_d は, それぞれ反転層電子と基板空乏層中に含まれるイオン化不純物原子のシート濃度である. MOSFET 反転層電子の場合, 上式で $\eta = 1/2$ として E_{eff} を定義すると, N_A にかかわらず移動度が一本の曲線上に乗る, いわゆる「ユニバーサル特性」が現れることが知られている. ただし, 図 5.15 に見られるように, N_A の異なる各サンプルのしきい値電圧近傍では, 移動度がユニバーサル曲線から外れ急激に減少する「ロールオフ現象」が確認される. これは, 反転層電子濃度が小さくなると基板不純物イオンの遮蔽効果が弱まり, イオン化不純物散乱によって移動度が制限されるためであると考えられている. これはまさに, 5.2 節で解析した, 陰イオンによる散乱で律速される電子移動度の電子濃度依存性を観測したものといえる. しきい値電圧近傍では, 反転層電子濃度も薄く, MOS 垂直電界も小さいので, Fermi 統計や量子閉じ込めといった量子効果の影響はあまり顕著ではない. したがって, この反転層電子移動度のロールオフ現象を, 電子を半古典粒子として扱う EMC/MD 法の格好の応用問題であると考え, 今回シミュレーションを実施した.

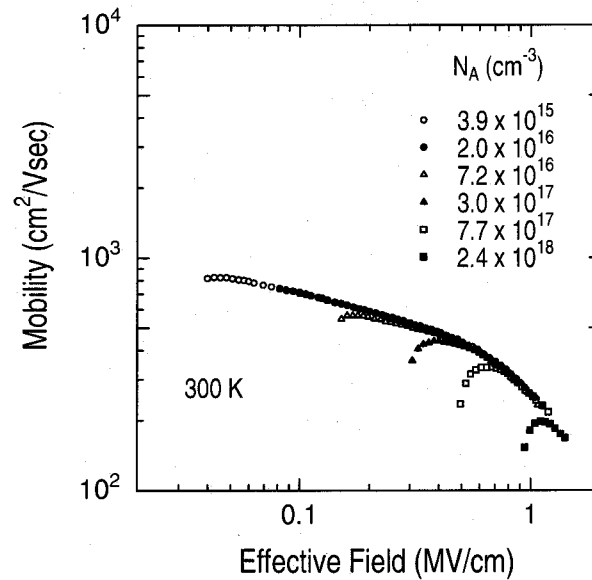


図 5.15: Takagi ら [19] による反転層電子移動度の測定結果. 測定温度は 300 K. 実効垂直電界 $E_{\text{eff}} = e(N_d + 0.5n_s)/\epsilon_{\text{Si}}$ を横軸に, 基板アクセプタ原子濃度 N_A が異なるサンプルの結果を表示している.

5.3.2 シミュレーション方法

シミュレーション系の定義

無限の面積を持つ MOS 構造中の反転層電子移動度を EMC/MD 法により解析した．想定した系の模式図を図 5.16 に示す．系内部には可動電荷である電子と固定電荷の陰イオンをランダムに配置する．ここで，界面に対し垂直な方向を z 軸，平行な方向を xy 平面とする．系の z 方向の長さは有限とし，MOS 表面の空乏層幅 z_d (計算法に関しては後述する) と等しく取った．また， xy 方向に関しては無限の広がりを考えるため，2次元の周期的境界条件を課した．すなわち，1辺 L の正方形単位セルを設定し，それと全く同じ電荷配置を持つレプリカを周期的に並べる．これは，図 5.3 で示したバルクのシミュレーション系に対する境界条件を 2次元方向のみに適用したことであり，同じである．

今，ある 1 電子の運動に着目するならば，界面平行方向の運動によって図 5.16 の側壁面に衝突した粒子は，対向する側面から現れることとなる．一方，系の底面 (空乏層端) および天井面 (Si/SiO₂ 界面) に衝突した電子については，反射させた．本研究では，Si 基板とゲート酸化膜の界面は，完全平坦であると仮定し，界面ラフネスの存在は考慮しなかった．このようなことから，天井と底の両面において電子は鏡面反射されるとした．具体的には，MD 計算中の電子座標の更新により，たとえば電子が天井面を通過した際，以下のような変換を電子の座標と波数ベクトルに対して施すことで，鏡面反射を実行した．

$$(x, y, z) \rightarrow (x, y, 2a - z) \quad (5.33)$$

$$(k_x, k_y, k_z) \rightarrow (k_x, k_y, -k_z) \quad (5.34)$$

ここで， $z = a$ を天井面と定義，1 タイムステップ前に $z < a$ の領域に存在した電子が座標更新により $z > a$ の領域にはみ出した場合を考えている．

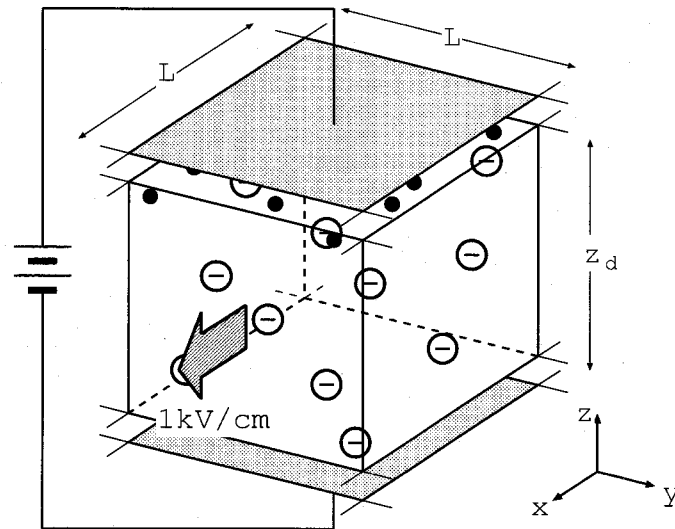


図 5.16: MOSFET 反転層電子輸送を解析するために仮定したシミュレーション系の模式図．イオン化アクセプタ原子を白丸，電子を黒丸で表している．2次元の周期的境界条件を x -, y -方向に対して課した．一方，天井と底の面では，電子は鏡面反射させた．外部電界として，電子を天井面に押し付けるための z -方向電界 (ゲート電界を模擬) と，電流を流すための x -方向電界 (ドレイン電界を模擬) を印加した．

電子 i に働く力 $\mathbf{F}_i$ はバルクのシミュレーション同様、次のように与えられる。

$$\mathbf{F}_i = \mathbf{F}_i^{\text{sr}} + \mathbf{F}_i^{\text{lr}} + \mathbf{F}^{\text{ext}} \quad (5.35)$$

ここで、 $\mathbf{F}_i^{\text{sr}}$ と $\mathbf{F}_i^{\text{lr}}$ は、粒子間力のそれぞれ短距離および長距離成分、また、 $\mathbf{F}^{\text{ext}}$ は外力である。MOS 系のシミュレーションの場合には、 $\mathbf{F}^{\text{ext}}$ として、図 5.16 に示すように、 x 方向のほか z 方向にも外部電界を印加した。ゲートからの電界を想定した z -方向電界は、電子分布を天井に押し付け、反転層を模擬した電子分布を形成させる役目を果たす。また、 x -方向には、1 kV/cm の低電界を印加し電子電流を駆動させた。長時間の EMC/MD シミュレーションを実行し、 x 方向に関する電子速度の集団的・時間的平均を取ることで低電界電子移動度が求められる。

力の計算方法

電子に働く $\mathbf{F}_i^{\text{sr}}$ 、 $\mathbf{F}_i^{\text{lr}}$ の計算法を説明するため、図 5.17 に系の断面模式図を示す。本研究では、電子に Coulomb 力を及ぼす電荷として、基板空乏層内部のアクセプタ陰イオン、チャネル反転層電子、ゲート空乏層中のドナー陽イオンを考慮した。さらに、Si/SiO₂ 界面の分極効果を考慮するため、SiO₂ 層に誘起される鏡像電荷を考慮した [17]。

注目している電子 i に働く短距離力は、電子 i を中心として定義されるカットオフ領域 R_i 内に存在する全ての点電荷からの反発 Coulomb 力を足し上げることによって計算した。なお、その際には、現実の点電荷のみならず、ゲート酸化膜中に仮想的に誘起される鏡像電荷をも考慮した。Si 基板内の座標 $\mathbf{r} = (x, y, z)$ に電荷量 q の点電荷が存在したとすると、酸化膜中に誘起される鏡像電

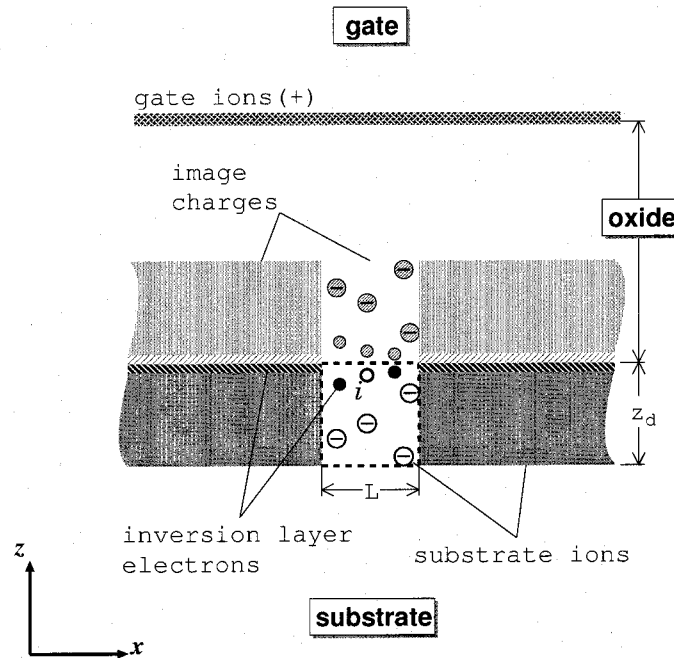


図 5.17: MOSFET 反転層電子輸送を解析するために仮定したシミュレーション系の断面図。 i 番目の電子に働く力として、電子 i を中心に設定されたカットオフ領域（破線で囲んだ領域）内部に存在するすべての点電荷と、外部の連続体電荷からの影響を考えた。電荷の種類として、基板空乏層中の陰イオン、反転層電子、ゲート空乏層中の陽イオン、さらに、これらの電荷が誘起する SiO₂ 膜中の鏡像電荷を考慮した。

荷の位置 $\mathbf{r}'(\mathbf{r})$ と電荷量 q' は以下のとおりとなる.

$$\mathbf{r}'(\mathbf{r}) = (x, y, 2a - z) \quad (5.36)$$

$$q' = \frac{2\varepsilon_{\text{ox}}}{\varepsilon_{\text{Si}} + \varepsilon_{\text{ox}}} q \quad (5.37)$$

ここで, $z = a$ を Si/SiO₂ 界面とした. 以上のことから, 着目する電子 i に働く短距離力として次式が得られる.

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_i^{\text{sr}} = & \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_{\text{Si}}} \frac{2\varepsilon_{\text{ox}}}{\varepsilon_{\text{Si}} + \varepsilon_{\text{ox}}} \frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}'(\mathbf{r}_i)}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}'(\mathbf{r}_i)|^3} \\ & + \sum_{j \neq i, \mathbf{r}_j \in R_i} \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_{\text{Si}}} \left(\frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^3} + \frac{2\varepsilon_{\text{ox}}}{\varepsilon_{\text{Si}} + \varepsilon_{\text{ox}}} \frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}'(\mathbf{r}_j)}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}'(\mathbf{r}_j)|^3} \right) \end{aligned} \quad (5.38)$$

ここで, 右辺第 1 項は電子 i 自身が誘起する鏡像電荷からの作用, 第 2 項では自分以外の点電荷およびそれらが誘起する鏡像電荷からの作用を足し上げている. バルクのシミュレーションと同様に, 電子 i は常にカットオフ領域の中心に存在し, これに短距離力を及ぼしうる他の点電荷は, 単位セル内部に限らず, 単位セルに隣接するレプリカ内に存在する可能性もある (図 5.3 を参照). MOS 系のシミュレーション場合は, カットオフ領域 R_i は次のように定義される.

$$|x - x_i| < \frac{L}{2}, |y - y_i| < \frac{L}{2}, a - z_d < z < a \quad (5.39)$$

電子 i に働く長距離力 $\mathbf{F}_i^{\text{lr}}$ を計算するために, カットオフ領域 R_i の外に存在する電荷は, すべて連続的かつ一様に分布すると仮定した. ゲートに存在する電荷は無限平面上に分布しているので, z 方向に電界を及ぼす. このゲート電界は, 外部電界 $\mathbf{F}^{\text{ext}}$ として考え, その大きさはシミュレーション条件として与えた. 一方, Si 基板中のイオン化不純物と反転層電子, およびそれらが誘起するゲート酸化膜内の鏡像電荷は, カットオフ領域外で無限に広がった分布を有する. これらの連続電荷は電子 i からみて左右に対称に存在するので, 力の z 方向成分のみを補正する働きがある.

この力を解析するため, まず図 5.18 に示すような, 厚さ ΔZ の正方形の薄板を考える. この板は体積密度 ρ で一様に帯電しているものとし, 正方形の中心から引かれた垂線上に存在する点電荷 (電荷量を q とする) に働く力をこれから解析する. 図中の濃い色で示した y 軸方向にのびた線上, すなわち $x = [X, X + \Delta X]$, $y = [-A, A]$, $z = [0, \Delta Z]$ の領域, に存在する電荷が, z 軸上におよぼすポテンシャルエネルギー $\phi(z, X)\Delta X\Delta Z$ は, Coulomb ポテンシャルの重ね合わせの原理から

$$\begin{aligned} \phi(z, X)\Delta X\Delta Z &= \int_{-A}^A dY \frac{\rho\Delta X\Delta Z}{4\pi\varepsilon\sqrt{X^2 + Y^2 + z^2}} \\ &= \frac{\rho\Delta X\Delta Z}{4\pi\varepsilon} \left(\log \left| A + \sqrt{X^2 + z^2 + A^2} \right| - \log \left| -A + \sqrt{X^2 + z^2 + A^2} \right| \right) \end{aligned} \quad (5.40)$$

と与えられる. この線状電荷が電荷 q に及ぼす力の z 方向成分 $f_{\text{line}}(z, X)\Delta X\Delta Z$ は, 上記ポテンシャルを z について微分することで得られ

$$\begin{aligned} f_{\text{line}}(z, X)\Delta X\Delta Z &= \frac{\partial}{\partial z} \phi(z, X)\Delta X\Delta Z \\ &= -\text{sgn}(z) \frac{q\rho A z}{2\pi\varepsilon(X^2 + z^2)\sqrt{X^2 + z^2 + A^2}} \Delta X\Delta Z \end{aligned} \quad (5.41)$$

となる. この結果を X に関し積分すると, 正方形の薄板全体が q におよぼす力 $f_{\text{square}}(z)\Delta Z$ が次のように得られる.

$$f_{\text{square}}(z)\Delta Z = \int_{-A}^A dX f_{\text{line}}(z, X)\Delta Z$$

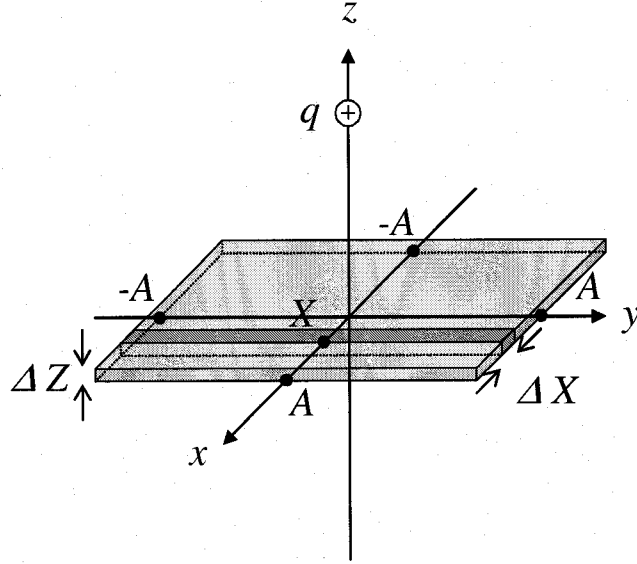


図 5.18: 一様に帯電した正方形の薄板と点電荷の位置関係. 正方形の 1 辺の長さは $2A$, 板の厚みは ΔZ である. 図に示すように, z 軸が正方形の中心を通るよう座標系を定義した. z 軸上に置かれた点電荷には, z 方向の力が作用する.

$$= -\text{sgn}(z) \frac{q\rho}{\pi\epsilon} \arctan\left(\frac{A^2}{z\sqrt{z^2 + 2A^2}}\right) \Delta Z \quad (5.42)$$

これに対し $A \rightarrow \infty$ の極限をとると, Gauss の法則から導かれる無限平板からの Coulomb 力と等しい結果が得られる.

$$\lim_{A \rightarrow \infty} f_{\text{square}}(z) \Delta Z = -\text{sgn}(z) \frac{q\rho}{2\epsilon} \Delta Z \quad (5.43)$$

無限平板から図 5.18 の正方形領域を取り除いた部分が, q におよぼす力 $\bar{f}_{\text{square}}(z)$ は, 式 (5.43) から式 (5.42) の結果を引くことで求められ,

$$\bar{f}_{\text{square}}(z) \Delta Z = -\text{sgn}(z) \frac{q\rho}{\pi\epsilon} \left[\frac{\pi}{2} - \arctan\left(\frac{A^2}{z\sqrt{z^2 + 2A^2}}\right) \right] \Delta Z \quad (5.44)$$

となる.

カットオフ領域外に存在する空乏層不純物が, 電子 i に働く長距離力 $\mathbf{F}_i^{\text{lr}}$ の z 成分に与える寄与は, 式 (5.44) に $\rho = eN_A$ を代入し空乏層幅で積分して

$$F_{z,i}^{\text{lr,imp}}(z) = \int_{z-(a-z_d)}^{z-a} \bar{f}_{\text{square}}(z') dz' + 0.5 \int_{z-a}^{z-(a+z_d)} \bar{f}_{\text{square}}(z') dz' \quad (5.45)$$

となる. ここで, 結果は電子の座標 z の関数として与えられる. 右辺第 1 項は実在する空乏層イオンからの力, 第 2 項はそれが酸化膜中に誘起した鏡像電荷 (電荷量は式 (5.37) によれば実電荷の約 0.5 倍となる) からの力である. 一方, 反転層電子からの長距離力の計算では, 反転層の厚みを無視し, 式 (5.44) に $\rho \Delta Z = en_s$ を代入して

$$F_{z,i}^{\text{lr,inv}}(z) = \bar{f}_{\text{square}}(z-a) \Delta Z + 0.5 \bar{f}_{\text{square}}(z-a) \Delta Z \quad (5.46)$$

とした。なお、ここでも、第2項は鏡像効果を表している。シミュレーション実行の際には、上の2つの式の数値積分結果を z に対する関数としてあらかじめテーブル化しておき、それを随時読み出すことで電子に働く長距離力を求めた。

シミュレーション条件の設定

モデル構造内に配置する粒子数であるが、以下のフローで計算した。まず、デバイス構造として、基板のドーピング濃度 N_A 、そして単位セルの1辺 L を決める。さらに、バイアス条件として、 z 方向の酸化膜電界 E_{ox} を与える。反転層形成時の基板空乏層幅 z_d は次式で計算した。

$$z_d = \sqrt{\frac{2\varepsilon_{Si}\Psi_s}{eN_A}} \quad (5.47)$$

ここで、 Ψ_s は表面反転時の基板のバンド曲がり度

$$\begin{aligned} \Psi_s &= 2\phi_b \\ &= 2\frac{k_B T}{e} \ln\left(\frac{N_A}{n_i}\right) \end{aligned} \quad (5.48)$$

と近似する。ここで、 ϕ_b はアクセプタをドープした基板 Si の Fermi エネルギーと真性 Fermi エネルギーの差である。また、 n_i は真性キャリア濃度であり、室温における Si に対する値として $1.45 \times 10^{10} \text{ cm}^{-3}$ を用いた。シミュレーション系の基板空乏層内に含まれる不純物原子数は：

$$z_d N_A L^2 \quad (5.49)$$

となる。さらに、Gauss の定理から、シミュレーション系の反転層に含まれる電子数は：

$$\left(\frac{\varepsilon_{ox} E_{ox}}{e} - z_d N_A\right) L^2 \quad (5.50)$$

でなければならない。ここで、 ε_{ox} はゲート酸化膜の誘電率であり、 SiO_2 として比誘電率 3.9 を仮定した。

5.3.3 結果と考察

反転層移動度のシミュレーション結果を図 5.19 に示す。図 5.15 に示した Takagi の実験結果と同様、横軸に実行垂直電界 E_{eff} をとり、3種類の基板アクセプタ濃度 N_A に対して特性を比較した。シミュレーションに用いたユニットセルの大きさは、 $L = 100 \text{ nm}$ である。それぞれの基板不純物濃度で決まるしきい値電圧付近で移動度が急激に低下する現象 [19] が、シミュレーションにおいても確認された。高いゲート電圧が印加されると、より高濃度の反転層電子が誘起されるとともに、電子分布が Si/SiO₂ 界面に向かって押し上げられ、反転層電子濃度が増す。それに従い、遮蔽効果が、イオン化不純物からのポテンシャルを弱め、移動度を上昇させる。強反転の極限においては遮蔽効果が強く働きイオン化不純物散乱の効果が消失する。また、本研究では、界面凹凸散乱の影響も考慮していないので、この時の結果はフォノン散乱律速移動度 ($\simeq 1,400 \text{ cm}^2/\text{Vs}$) に帰着すると予想される。しかしながら、図 5.19 に示すように、EMC/MD シミュレーションの実行結果は、決してそうならなかった。この原因として、電子-電子散乱による非平衡電子分布関数の変調効果が、移動度に間接的影響を及ぼしていることが考えられる [10]。図 5.20 は、基板不純物分布を一様連続と近似することで電子-イオン間相互作用の影響を取り除き、EMC/MD シミュレー

シオンを行った結果である。実際、電子濃度増加のみの効果によって移動度が低下することが確認された。本効果が、通常界面凹凸散乱で律速されると考えられている領域における反転層移動度へのどの程度影響しているのかは、興味深いところであり、今後の研究課題である。

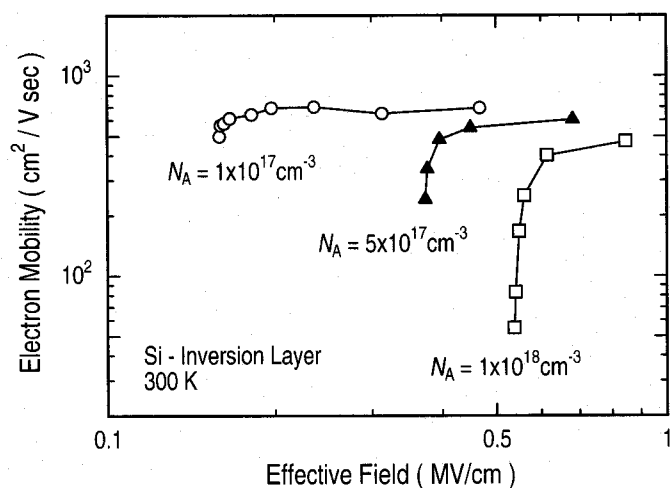


図 5.19: 反転層電子移動度の実効電界依存性のシミュレーション結果。基板不純物濃度 N_A をパラメータとしている。格子温度 300 K とした。

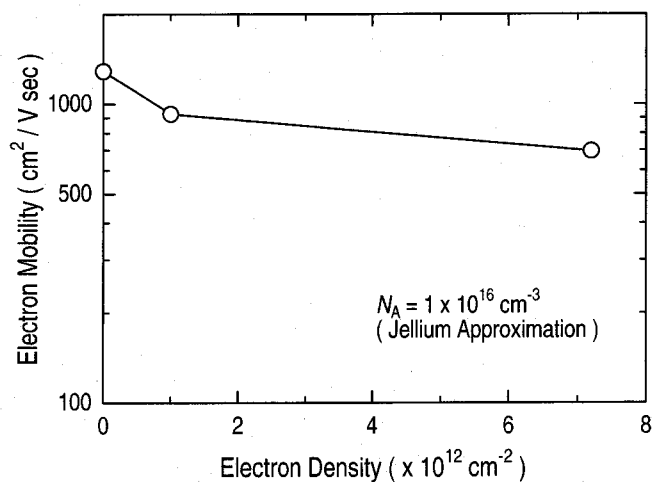


図 5.20: 電子-イオン相互作用を無視してシミュレーションした反転層電子移動度の電子濃度依存性。基板不純物濃度 $N_A = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ を、一様連続分布と仮定した。

5.4 反転層移動度に対するリモートイオン散乱効果の解析

5.4.1 シミュレーション対象

MOSFET の微細化が進行すると、従来無視できた効果がデバイス性能に大きな影響を及ぼすことがある。例えば、ゲート poly-Si 空乏化により絶縁膜/ゲート界面近傍に現れる不純物電荷が、反転層電子移動度の低下要因となる、いわゆるリモートイオン化不純物散乱 [3, 4] が、ゲート絶縁膜の急激な薄膜化とともに懸念されるようになった。ここでは、EMC/MD 法の応用例として、リモートイオン散乱効果を取り上げる。

5.4.2 シミュレーション方法

鏡像法による電界計算

今回解析した系では Si 層の間に薄い SiO₂ 層が挟まれた場合を想定している。電子が実際に存在する MOSFET 反転層領域から近い位置に、基板 Si/SiO₂ と SiO₂/ゲート poly-Si といった 2 つの界面が存在するため、MD で扱う粒子が誘起する界面分極電荷の取り扱いも複雑になる。ここでは、各々異なる誘電率を持つ 3 つの物質が接触した系内において、点電荷が形成する電位分布を鏡像法により解析する方法を示す。

図 5.21 に系の構造を定義する。半無限の層 1 と層 3 の間に、厚さ t の層 2 がはさまれている。層 1, 2, 3 の誘電率をそれぞれ $\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3$ 、またそれぞれの層内部で定義される電位分布を ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3 とおく。系 1 内部に電荷量 q の点電荷が存在したとし、そのときの系内の電位分布を考えることとする。たとえば、 ϕ_2 に興味があるとすると、たとえ層 1, 層 2 に人為的に電荷を配置したとしても層 2 内の電荷分布さえ変えなければ、 ϕ_2 に対する Poisson 方程式は不変であって境界条件のみが影響される。これと全く同じ議論は、 ϕ_1 や ϕ_3 についても成り立ち、自分が定義されている領域以外の場所に仮想的な点電荷を配置しても構わないとしよう。物理的に唯一要請されるのは、

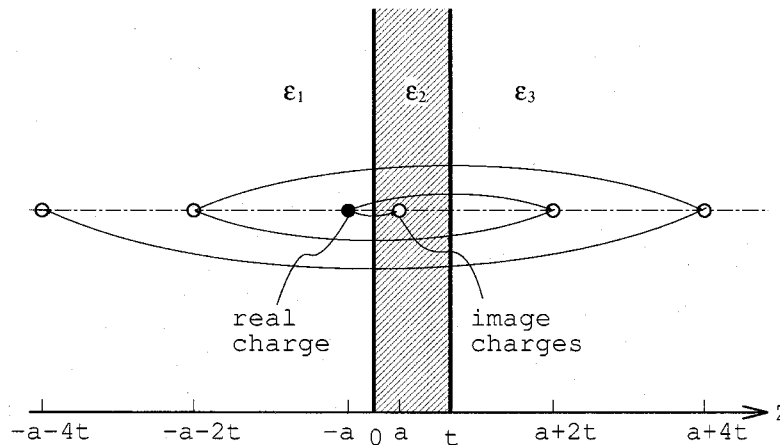


図 5.21: $z = -a$ に存在する電荷 (黒丸) によって誘起される鏡像電荷 (白丸)。層 1, 2, 3 の誘電率はそれぞれ $\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3$ である。層 2 の厚さを t とする。

界面における電位と電束密度の連続条件

$$\begin{cases} \phi_1|_{z=-0} = \phi_2|_{z=+0}, & \varepsilon_1 \frac{\partial \phi_1}{\partial z} \Big|_{z=-0} = \varepsilon_2 \frac{\partial \phi_2}{\partial z} \Big|_{z=-0} \\ \phi_2|_{z=a-0} = \phi_3|_{z=a+0}, & \varepsilon_2 \frac{\partial \phi_2}{\partial z} \Big|_{z=a-0} = \varepsilon_3 \frac{\partial \phi_3}{\partial z} \Big|_{z=a+0} \end{cases} \quad (5.51)$$

を満足するか否かである。すなわち、上記境界条件を満たすような仮想的な点電荷（鏡像電荷）の配置を見つけたことができたならば、それら仮想電荷からの Coulomb ポテンシャルを足しあげるだけで Poisson 方程式を解いたことになる。

図 5.21 には、上の議論を満たす鏡像電荷の配置の模式図を、また表 5.3 には実際に電位分布を計算するための式を示した。実電荷が界面に対する鏡像位置に鏡像電荷を誘起するだけでなく、生じた鏡像電荷自体もさらにその鏡像を誘起するといった具合に、この連鎖は無限に繰り返される。これは丁度、2 枚の鏡を平行に並べて中を覗くと無限に像が現れる現象とよく似ている。

図 5.22 は、実際に表 5.3 の式を用いて計算した Si/絶縁膜/Si 系における電位分布である。Si/絶縁膜界面近傍に存在する正の点電荷が形成する電位分布を等高線プロットしている。絶縁膜としては、従来より MOSFET に利用されてきた比誘電率 3.9 の SiO₂、および次世代 LSI での導入が検討されている high-k 絶縁膜の候補の 1 つ、比誘電率 30 の HfO₂ を例にとった。物質界面において、電束密度連続の条件、式 (5.51) から要請される電界の屈折が反映されていることがわかる。

表 5.3: 図 5.21 により定義された系での電位分布を与える式。 ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3 はそれぞれ層 1, 2, 3 内部の電位分布を表す。 q は層 1 の内部に存在する実電荷の電荷量、 $q_n^{(1)}, q_n^{(2)}, q_n^{(3)}$ はそれぞれ、層 1 から層 2・3 方向、層 2 から層 1, 層 2 から層 3, 層 3 から層 1・2 方向を見た時に現れる鏡像電荷の電荷量を表す。

$$\begin{aligned} \phi_1(x, y, z) &= \frac{q}{4\pi\varepsilon_1\sqrt{(z+a)^2+x^2+y^2}} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{q_n^{(1)}}{4\pi\varepsilon_1\sqrt{(z-a-2nt)^2+x^2+y^2}} \\ \phi_2(x, y, z) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{q_n^{(2)}}{4\pi\varepsilon_2\sqrt{(z+a+2nt)^2+x^2+y^2}} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{q_n^{'(2)}}{4\pi\varepsilon_2\sqrt{(z-a-2nt)^2+x^2+y^2}} \\ \phi_3(x, y, z) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{q_n^{(3)}}{4\pi\varepsilon_3\sqrt{(z+a+2nt)^2+x^2+y^2}} \\ q_0^{(1)} &= \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} q, \quad q_n^{(1)} = \frac{2\varepsilon_1}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} q_n^{'(2)} \quad (n \geq 1) \\ q_0^{(2)} &= \frac{2\varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} q, \quad q_{n+1}^{'(2)} = \frac{\varepsilon_2 - \varepsilon_3}{\varepsilon_2 + \varepsilon_3} q_n^{(2)} \quad (n \geq 0), \quad q_n^{(2)} = \frac{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} q_n^{'(2)} \quad (n \geq 1) \\ q_n^{(3)} &= \frac{2\varepsilon_3}{\varepsilon_2 + \varepsilon_3} q_n^{(2)} \quad (n \geq 0) \end{aligned}$$

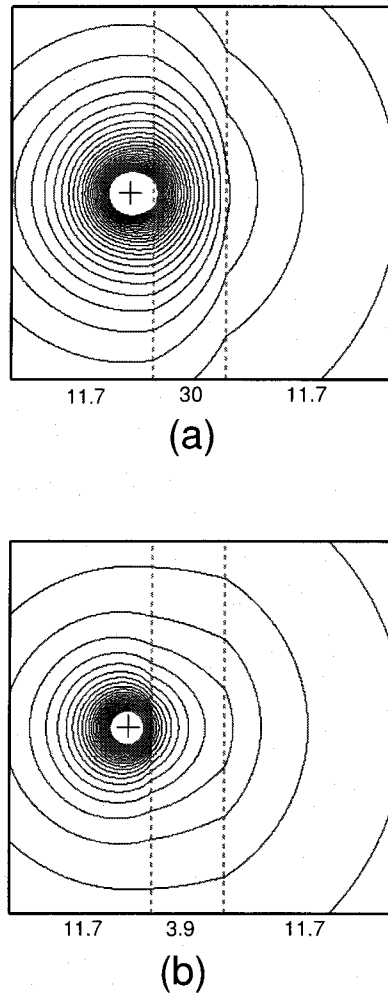


図 5.22: 図 5.21 により定義された系での電位分布を、表 5.3 で示した方法で計算した結果。等電位線を実線で、膜の界面を点線で、点電荷の位置を+印で示している。(a) Si/SiO₂/Si 系を想定し、 $\epsilon_1 = \epsilon_3 = 11.7\epsilon_0$ 、 $\epsilon_2 = 3.9\epsilon_0$ とした場合。ここで、 ϵ_0 は真空の誘電率である。(b) ゲート絶縁膜として SiO₂ の代わりに高誘電率膜 (HfO₂) を用いた場合を想定し、 $\epsilon_2 = 30\epsilon_0$ とした場合。

電子の運動のシミュレーション方法

チャネル平行方向に対して無限の面積を有し、SiO₂ 換算で 10 nm 以下の極めて薄いゲート絶縁膜を持った MOS 構造における反転層電子移動度を、EMC/MD 法により解析した。シミュレーション系やその境界条件については、5.3 節で実施した MOS 反転層電子輸送シミュレーションにおける設定 (図 5.16 参照) を基本的に踏襲した。しかし、ゲート絶縁膜層が薄く、チャネルとゲートが近接しているという点から無視できなくなる以下の効果を、新たに導入する。

1. ゲート電極に誘起された正電荷は連続かつ一様に分布するとは仮定しない。すなわち、ゲート空乏層中に存在するドナーイオンも点電荷の集合として導入する。
2. 点電荷による Coulomb 力の計算の際には、ゲート電極の存在も考慮し、5.3 節で用いた鏡像法を使用する。

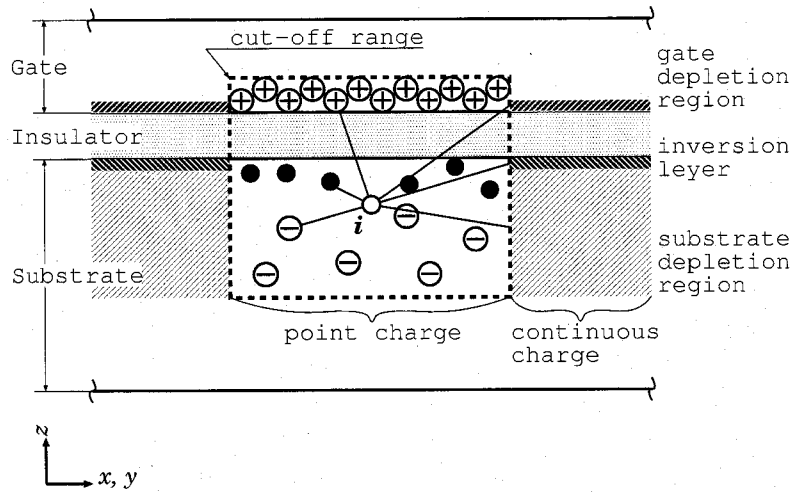


図 5.23: MOSFET 反転層電子輸送にリモートイオン散乱効果が与える影響を解析するために仮定したシミュレーション系の断面図. i 番目の電子に働く力として, 電子 i を中心に設定されたカットオフ領域 (破線で囲んだ領域) 内部に存在するすべての点電荷と, 外部の連続体電荷からの影響を考えた. 電荷の種類として, 基板空乏中の陰イオン, 反転層電子, ゲート空乏層中の陽イオン, さらに, これらの電荷が誘起する鏡像電荷を考慮した.

図 5.23 に, シミュレーション系の断面図を示す. これは, ゲート空乏層内の点電荷分布が考慮された点を除けば, 図 5.17 と同じ構造である. 注目している電子 i を中心に, カットオフ領域 R_i

$$|x - x_i| < \frac{L}{2}, |y - y_i| < \frac{L}{2} \quad (5.52)$$

を設定し, その外部の電荷は連続的かつ一様に分布すると近似して力の計算を行う.

電子 i に働く短距離力 $\mathbf{F}_i^{\text{sr}}$ の計算には, 基板空乏層中の陰イオン, 反転層電子のほか, ゲート空乏層中の陽イオンからの影響を考慮した. また, 界面分極の影響を反映するために, 鏡像電荷からの Coulomb 力も取り入れた. 2つの物質界面が存在する現在の系において, 1個の実電荷が誘起する鏡像電荷の個数は, 図 5.21, 表 5.21 によれば, 原理的には無限個となる. しかしながら, 実際の数値シミュレーション中に無限個の点電荷からの力を計算することは不可能であり, また鏡像の電荷量の大きさは距離が離れるごとに小さくなっていくことから, 遠方の鏡像電荷の存在を無視することとした. 実際に今回のシミュレーションで考慮した鏡像電荷を, 図 5.24 に示す. 基板 Si 内に存在する実電荷が誘起する鏡像電荷については最近接 3 個まで, 一方絶縁膜をはさんでゲート poly-Si 内に存在する実電荷に対しては, 最近接 2 個まで鏡像を考慮した.

電子 i に働く長距離力 $\mathbf{F}_i^{\text{lr}}$ を計算するために, カットオフ領域 R_i の外に存在する電荷は, すべて連続的かつ一様に分布すると仮定する. これらの連続電荷は電子 i からみて左右に対称に存在するので, 力の z 方向成分のみを変調させる. 考慮した電荷の種類は, 反転層電子と基板空乏層イオン, およびそれらが誘起する最近接 3 個までの鏡像電荷, さらにゲート空乏層イオンとそれが誘起する最近接 2 個までの鏡像電荷である. これら連続電荷が電子に及ぼす長距離力は, 5.3 節と同様, シミュレーション開始前にあらかじめ数値積分を実行し, z の関数としてテーブル化しておいた.

最後に外力成分 $\mathbf{F}^{\text{ext}}$ として, 界面平行方向に 1 kV/cm の電界を印加し, 電子をドリフトさせることで低電界移動度を評価した.

モデル構造内に配置する粒子数については, 以下のフローで計算した. まず, 系の大きさとして, 単位セルの 1 辺の長さ L と, ゲート絶縁膜の厚さ t_{ox} を定義する. 基板 Si とゲート poly-Si の

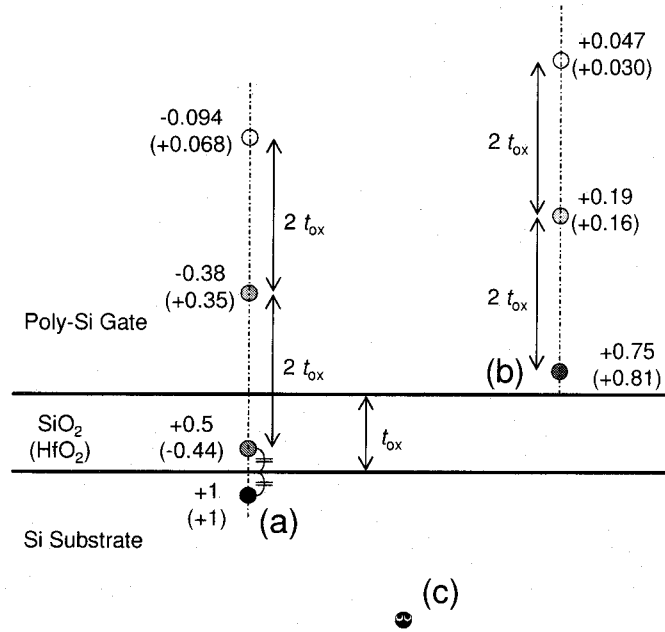


図 5.24: シミュレーションで考慮した鏡像電荷の位置と電荷の大きさ. Si 基板中 (c) の位置にいる電子が, Si 基板中 (a) に存在する点電荷から受ける力を計算するには, (a) に近い 3 番目までの鏡像電荷を考えた. 一方, poly-Si ゲート中の (b) にある点電荷の場合には, (b) に近い 2 番目までの鏡像電荷を考えた. 点電荷の傍らに記した数値は, 実際の点電荷の電荷量を 1 とした場合, (c) からはいくつの電荷量として見えるかを示している. ゲート絶縁膜としては, 比誘電率 3.9 の SiO₂ と比誘電率 30 の HfO₂(カッコ内) を考えた.

ドーピング濃度をそれぞれ N_A , N_D , また誘電率をともに $\epsilon_s (= 11.7\epsilon_0)$ とおく. さらに, ゲート絶縁膜材料の誘電率 ϵ_{ox} , およびバイアス条件として, z 方向の絶縁膜電界 E_{ox} を与える. 反転層形成時の基板空乏層幅 z_d は, 5.3 節で行ったシミュレーションと同様に, 式 (5.47) から計算される. このとき, 基板空乏層内に配置すべきアクセプタイオンの個数は:

$$z_d N_A L^2 \quad (5.53)$$

と得られ, 一方, Gauss の定理よりゲート空乏層内のドナーイオンの個数は:

$$\frac{\epsilon_{ox} E_{ox}}{e} L^2 \quad (5.54)$$

となる. さらに, 両電極の電荷量の釣り合いを考慮すると, 基板電子数は:

$$\left(\frac{\epsilon_{ox} E_{ox}}{e} - z_d N_A \right) L^2 \quad (5.55)$$

とならなければならない. 最後にゲート空乏層幅は:

$$\frac{\epsilon_{ox} E_{ox}}{e N_D} \quad (5.56)$$

から計算した.

5.4.3 結果と考察

界面ポテンシャルのゆらぎ

ここでは、酸化膜厚が薄膜化した際、リモートイオン散乱効果が無視できなくなる理由について、界面ポテンシャルの揺らぎという観点から考察を行う。

図 5.25 は、リモートイオンの電荷分布を連続体とみなす近似の意味について調べた結果である。ここでは、例として帯電した無限平面が点電荷に及ぼす電界の垂直成分を計算した。平面を点電荷直下の正方形領域 A 、およびそれ以外の領域 B に分割し、それぞれの内部に存在する電荷分布が、点電荷の集合、あるいは連続的であるときの電界の計算結果を比較している。平面から十分離れている場所では、領域 A 、 B とともにその内部の電荷分布を連続とみなす近似が電界計算に対してうまく機能する。しかしながら、平面に近づくにつれ、領域 A に関しては電荷を一樣連続とみなせなくなり、電荷分布の形態に依存して電界の計算結果に食い違いが出はじめる。遠方から眺めると電荷分布は均一化されて感じられるが、近づくとも電荷の粒々が目立つのである。そしてこれが、絶縁膜を薄くした際にチャンネル電子移動度を低下させる要因となると考えられる。

さらに、このポテンシャルゆらぎについて簡単な解析 [31] を行う。図 5.26 のように等間隔 a で、(この場合簡単のため) 線電荷が並んでいる状況を考える。いま、ポテンシャル分布 $\phi(x, z)$ の各周期成分を以下の形に置く。

$$\phi(x, z) = F_n(z) \cos \frac{2\pi n x}{a} \quad (5.57)$$

この時、 ϕ は次の Laplace 方程式を満たす。

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} = 0 \quad (5.58)$$

式 (5.57) を式 (5.58) に代入すると、

$$\frac{d^2 F_n}{dz^2} = -\frac{4\pi^2 n^2}{a^2} F_n \quad (5.59)$$

となり、この微分方程式を解くと、

$$F_n = A_n e^{-z/z_0} \quad (5.60)$$

が得られる。ここで、

$$z_0 = \frac{a}{2\pi n} \quad (5.61)$$

である。この結果からも分かるとおり、電位分布のゆらぎの振幅は平面から離れるほど減衰し、短周期の成分ほど減衰は速い。電荷の間隔程度の周期をもつゆらぎについては、大体その間隔と同じ距離だけ面から離れると目立たなくなる。

図 5.27 は、実際にシミュレーションで使った状況下での、Si/SiO₂ 界面におけるポテンシャル分布をプロットした図である。酸化膜厚が薄いほど、短い波長の凸凹が目立ち、またその振幅も大きいことがわかる。

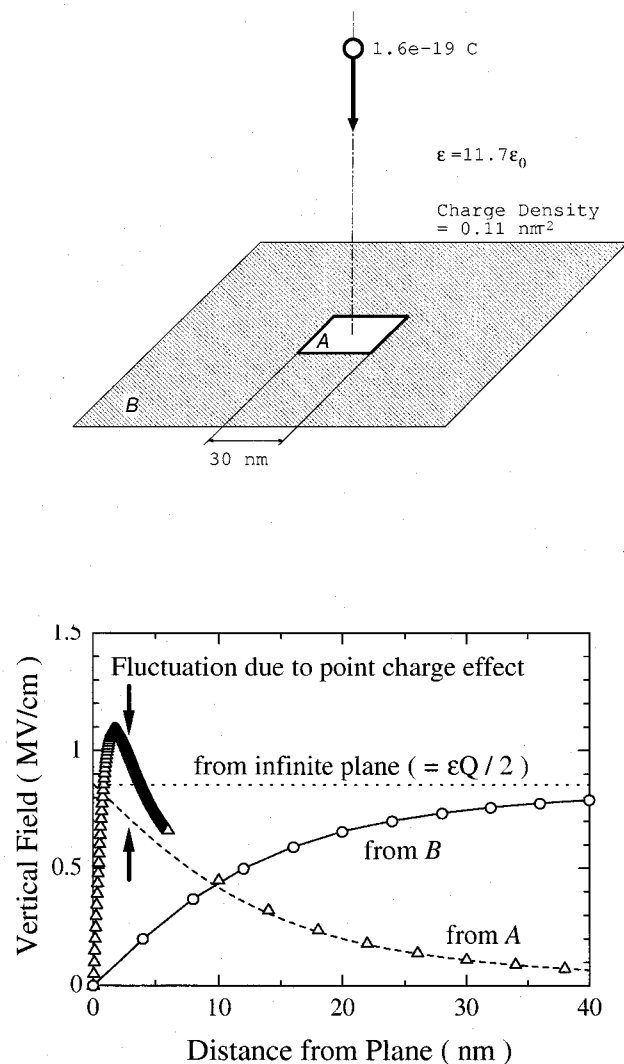


図 5.25: 帯電した無限平面が点電荷に及ぼす電界の性質. 上図... 無限平面は $+1.6 \times 10^{-19} \text{ C} \times 0.11 \text{ nm}^{-2}$ に帯電しているものとする. 平面を点電荷直下の 1 辺 30 nm の正方領域 A とそれ以外の領域 B に分割する. 下図... 点電荷が平面から受ける力の垂直成分の大きさと面からの距離の関係. 線は面内の電荷分布が一様な連続体であるとした時の結果. A, B 两部分からの寄与を合計すると距離に依存しないガウス則 ($= \epsilon Q / 2$) となる. 印は, 面内の電荷が一様に分布する点電荷の集まりとして計算した場合の結果である. B からの寄与 (白丸) に関しては, 連続体近似の結果と一致する. しかし, A については (白三角), 点電荷が面に近づくにつれて面内の電荷分布の不均一性が目立ち始め, 電界計算に対する連続体近似が破綻する.

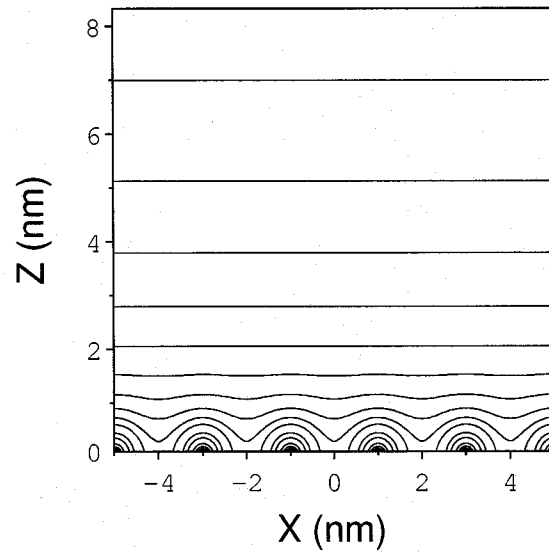


図 5.26: 等間隔に並んだ線電荷が形成するポテンシャルの等高線.

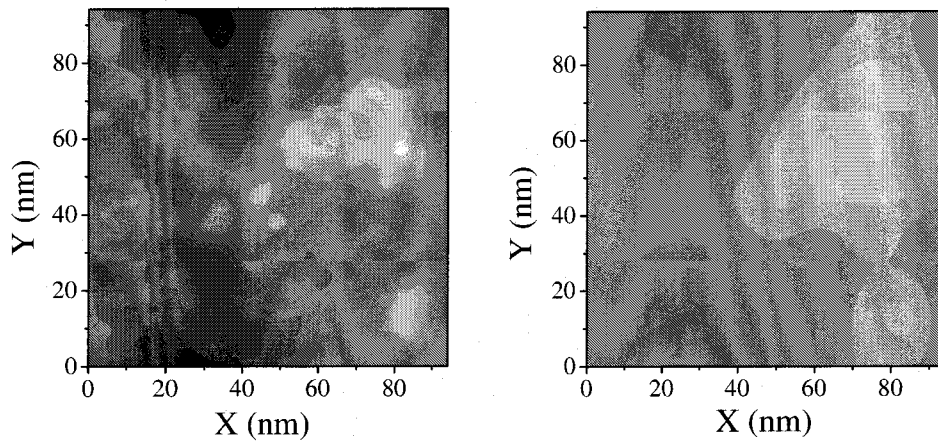


図 5.27: Si/SiO₂ 界面におけるポテンシャル分布. 酸化膜厚は 0.75 nm (左) と 10 nm (右).

移動度のシミュレーション結果

表 5.4 にまとめた条件で、MOS 反転層中の電子移動度シミュレーションを行った。絶縁膜電界として 2 種類、さらにゲート絶縁膜材料として、従来の SiO_2 のほかに、高誘電体膜である HfO_2 (比誘電率は 30 [32]) の場合を調べた。

図 5.28 は、ゲート絶縁膜が SiO_2 の場合の、電子移動度のシミュレーション結果である。ここでは、酸化膜電界を 2.5 MV/cm と 5 MV/cm に固定し、酸化膜厚を変化させて移動度を計算した。ゲート酸化膜の薄膜化とともに移動度が低下し、とくに 2 nm を切る辺りで急激な低下が観測された。ゲート不純物の 2 次元平均距離を見積もると、酸化膜電界が 2.5 MV/cm および 5 MV/cm の場合について、それぞれおよそ、2.4 nm と 1.7 nm となる。これは、移動度の落ちが目立ち始める膜厚とほぼ等しく、先に行ったポテンシャル揺らぎに関するラフな検討結果とも矛盾しない。なお、移動度低下は酸化膜電界が大きいほど激しい結果が得られた。まず、(1) 酸化膜電界が強いほど、poly-Si 空乏化が激しくなるので、より多くのイオン化不純物がゲート側に現れる。さらに、(2) 垂直電界によって電子がより強く Si/SiO₂ 界面に押し付けられ、界面ポテンシャルゆらぎの影響を受けやすくなることも、顕著な移動度低下の要因と考えられる。一方、膜厚の厚い領域では、酸化膜電界が強いほど、移動度が大きい。これは 5.3 節で見た、基板不純物イオンの遮蔽効果の影響である。ゲートのリモートイオンに関しても、反転層電子による遮蔽効果が働くはずだが、上記 (1)、(2) の効果が本シミュレーションでは支配的であったものと考えられる。

図 5.29 は、ゲート絶縁膜として HfO_2 を用いた場合のシミュレーション結果である。 SiO_2 膜の時と同様、薄膜化による移動度低下が観測された。(物理膜厚) $\times (\epsilon_{\text{SiO}_2}/\epsilon_{\text{HfO}_2})$ で定義される実効酸化膜厚 (EOT) で、横軸をプロットすると、移動度が低下し始める膜厚が、 SiO_2 の場合と比較してずっと薄いことが分かる。むしろ、実際の物理膜厚で比べた場合に、 SiO_2 の場合と良く似た特性を示す。この原因は、絶縁膜を介して自分と反対側に存在する電荷が、どのように見えるのかを考えることで理解できる。図 5.30 に点電荷およびそれが誘起する鏡像の電荷量を計算した結果を示す。 SiO_2 膜と HfO_2 膜を挟んで見た電荷は、ほとんど同じ大きさとして見えることが分かる。このことから、同一の物理膜厚を有する場合、両膜に対するシミュレーション条件が似通り、結果的

表 5.4: シミュレーションに使用したパラメータ。

Gate Doping Density (cm^{-3})	1.0×10^{20}			
Sub. Doping Density (cm^{-3})	1.0×10^{17}			
Gate Dielectrics	$\text{SiO}_2 (\epsilon_r = 3.9)$		$\text{HfO}_2 (\epsilon_r = 30)$	
Oxide Thickness (nm)	0.75 - 100		0.15 r^a - 30 r	
Oxide Field (MV/cm)	2.5	5.0	2.5/ r	5.0/ r
Bare Gate Ion Density ^{b)} (10^{12} cm^{-2})	5.4	11	5.4	11
Bare Sub. Ion Density ^{c)} (10^{12} cm^{-2})	1.2	1.2	1.2	1.2
Inversion Electron (10^{12} cm^{-2})	4.2	9.8	4.2	9.8
Unit cell size (nm)	49	32	49	32
Number of Simulated Electrons	100	100	100	100

a) $r = \epsilon_{\text{HfO}_2}/\epsilon_{\text{SiO}_2}$.

b) From Gauss's law: $Q = \epsilon E$.

c) Substrate band bending is approximated to $2\phi_F$.

にほぼ同じ移動度特性が得られたものと考えられる。

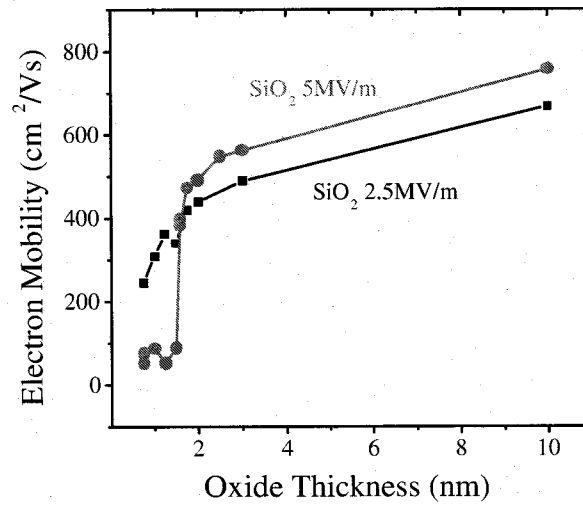


図 5.28: 反転層電子移動度の酸化膜厚依存性のシミュレーション結果. 2 種類の酸化膜電界に対する特性をプロットしている.

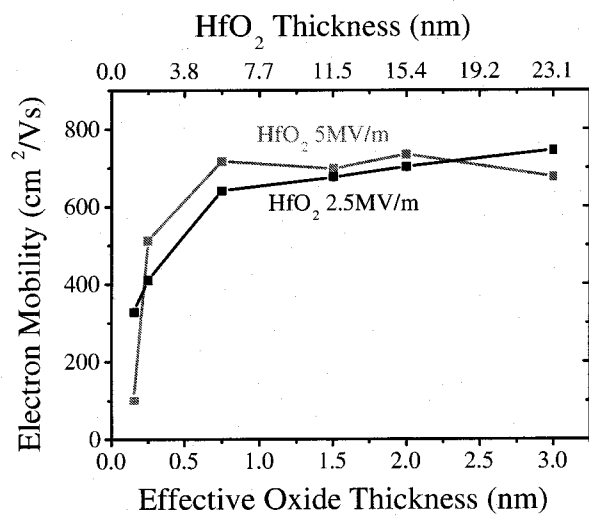


図 5.29: HfO₂ をゲート絶縁膜とする MOS 構造における反転層電子移動度の実効酸化膜厚 (EOT) 依存性. $EOT = (\text{物理膜厚}) \times (\epsilon_{\text{SiO}_2} / \epsilon_{\text{HfO}_2})$ とした. 2 種類の絶縁膜電界に対する特性をプロットしている.

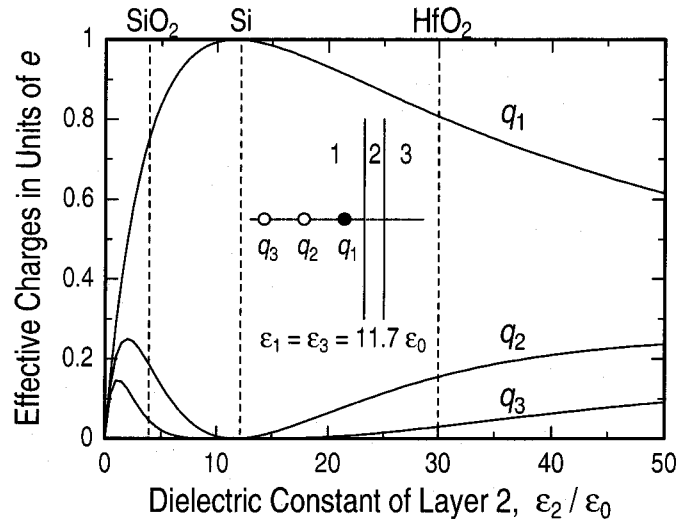


図 5.30: 点電荷およびそれが誘起する鏡像の電荷量を絶縁層誘電率 ϵ_2 に対してプロットした図. 挿入図にあるように, 層 1 ($\epsilon_1 = 11.7\epsilon_0$) に存在する電荷量 e の点電荷が, 誘電率 ϵ_2 の膜を透して, 層 3 ($\epsilon_3 = 11.7\epsilon_0$) からどのように見えるのかを調べた. q_1 は実際の電荷, q_2, q_3 はその鏡像電荷. $\epsilon_2 = \epsilon_1 = \epsilon_3$ の時は, 当然 $q_1 = e, q_2 = q_3 = 0$ となる. また, 層 2 が Si と HfO₂ の場合では, 各電荷の大きさがあまり異ならない.

問題点の指摘と今後の課題

最近, Takagi らは, 極めて薄いゲート酸化膜を有する MOSFET の反転層電子移動度を実測した [5]. その結果を図 5.31 (a) に示す. EMC/MD シミュレーションの結果, すなわち図 5.31 (b) と見比べると, 低垂直電界領域において薄膜化による移動度低下が見られる点については, 実験とシミュレーションで共通である. しかしながら, 高垂直電界下においては, シミュレーション側でリモートイオンの影響による劇的な移動度低下が見られるのに対し, 実験値にはほとんど影響が見られない. 今回のシミュレーションでは, 界面凹凸散乱を考慮していないので, この移動度の落ち込みは, リモートイオン散乱が原因であると考えられる. 一般的な反転層電気伝導の描像によれば, 高い垂直電界のもとでは, 反転層電子濃度が増加するので, その電荷遮蔽効果によって不純物散乱は抑制される. 当然, ゲートに存在するイオン化不純物に対しても反転層電子による遮蔽が働くものと予想される. ただ, 今回のシミュレーションでも, 5.2.2 節で詳しく解析したように, 古典的な意味での遮蔽効果は正しく反映できているはずである. 実際, $T_{ox} = 3 \text{ nm}$ のシミュレーション結果を見ると, 低垂直電界下ではリモートイオン散乱の影響が確認されるのに対し, 高垂直電界領域では遮蔽効果のためその影響はほとんど現れていない. シミュレーションで観測された高垂直電界かつ薄膜領域での移動度落ち込みは, 垂直電界の増加により, (1) 反転層電子濃度が増加し, リモートイオンの遮蔽がより強く働く, (2) 電子分布がより Si/SiO₂ 界面により強く押し付けられ, 電子がリモートイオンによるポテンシャル揺らぎの影響をより強く受ける, という 2 つの相反する効果のうち, 後者が支配的な影響を電子移動度に及ぼしたことを示唆する. それでは, 何が, 実験と我々のシミュレーションの違いをもたらしたのであろうか? 現時点では, 以下の 2 つの原因を考えている.

1 つには, 本シミュレーションでは考慮できない種々の量子効果が, 重要な影響を及ぼすことが考えられる. 例えば, 古典力学的には垂直方向の電子濃度分布は界面で最大となるが, 実際には量子化のため, 図 5.32 のように, 分布の中心は界面から離れて存在する. そうなると, 電子に対す

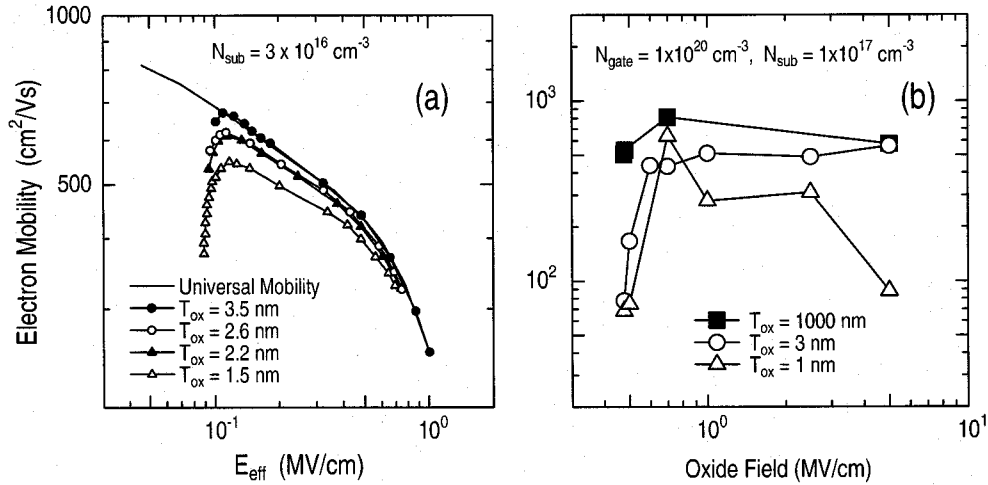


図 5.31: (a) Takagi らにより実測された、極薄ゲート酸化膜 MOSFET における反転層電子移動度の実効電界依存性 [5]。純粋な SiO_2 をゲート絶縁膜を使用している。(b) EMC/MD 法により計算した反転層電子移動度の酸化膜電界依存性。界面凹凸散乱は考慮していない。

るリモートイオン化不純物の影響が小さくなり、結果的に図 5.28 で移動度の低下し始める膜厚が、薄膜領域側へシフトすると考えられる。図 5.33 によれば、電子の古典および量子力学的分布の中心位置の典型的差は、およそ 1~1.5 nm 程度である。これだけ実質的に膜厚が厚くなったと思えば、図 5.28 でみた非常に悲観的な移動度低下は、非現実なほど (0.5 nm 以下) まで、膜厚を薄くしない限り回避できるであろう。本効果については、例えば、量子補正ポテンシャルを考慮した MC 法 [33] などの導入が解決策として挙げられ、今後の研究課題と考えている。

また、今回仮定したゲート空乏層領域内部には電子が全く存在していないと仮定したが、実際には電子とイオン化ドナーがともに存在し、差し引きの正味の電荷量として表面電荷層を形成している。すなわちゲート電子による遮蔽効果も実際は作用しているはずで [34]、今回のシミュレーションでは、リモートイオンの遮蔽効果を過小評価している恐れがある。これを考慮しようとするゲートにも電子を導入する必要があるが、電子と正の不純物電荷を同一領域に共存させるシミュレーションに関しては、5.2 節でも触れたが、数値計算上の不安定性が大きな問題となる。なお、この問題点も、半古典近似である EMC/MD 法の限界から来るものである。今後、ドナー不純物のポテンシャル形状を工夫する [20] などの対策が必要であろう。また、ゲートの電子がシミュレーションできるようになると、チャネル電子とゲート電子間運動量のやり取りなどのいろいろな面白い解析ができると考えている [11, 14]。

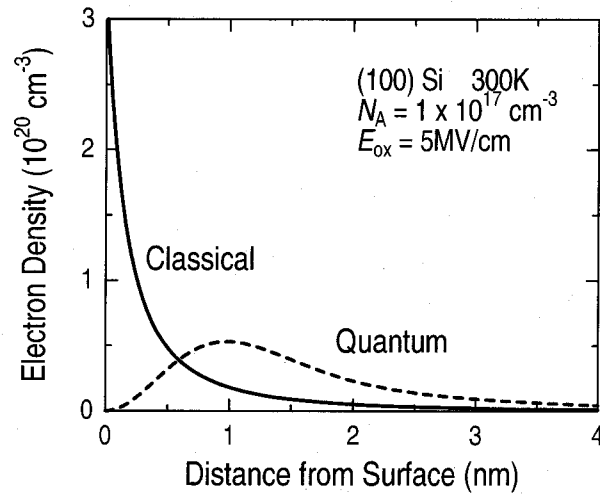


図 5.32: MOS 反転層の電子濃度分布. 古典力学 (実線) および量子力学 (破線) に従って計算した結果を比較した. 横軸は Si/SiO₂ 界面からの距離である.

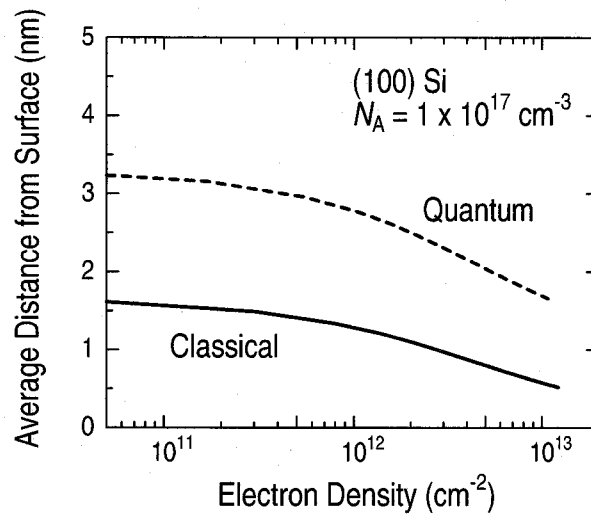


図 5.33: 反転層電子濃度分布の平均的位置. 古典力学 (実線) および量子力学 (破線) に従って計算した結果を反転層電子濃度の関数としてプロットした.

5.5 まとめ

本章では、EMC/MD 法を用いて、陰イオンと電子が混在した系での電子輸送シミュレーションを行い、その妥当性と問題点を評価した。

まず、3次元バルク系での電子輸送をシミュレーションした。イオン化アクセプタ原子が分布している Si 中の低電界電子移動度を求めたところ、計算結果には遮蔽効果の影響により電子濃度依存性が現れた。従来より一般的に用いられてきた Brooks-Herring モデルの結果と比較したところ、ファクタで 1.5~2 倍程度低い値が得られ、それは実験値により近い値であった。両者の計算法の違いには、多重イオン散乱、動的遮蔽や、電子電子散乱によって分布関数の形状が変化する効果、などが考えられるが、これらは全て EMC/MD 法で自動的に考慮することができる。

続いて、EMC/MD 法を MOS 反転層電子輸送に応用した。まず、鏡像法による力の計算法や、カットオフ近似を補正するための垂直電界計算法など、MOS 系の解析に必要なアルゴリズムを示した。次いで応用例として、MOS 反転層移動度の垂直電界依存性を解析したところ、低垂直電界側で実測される移動度のロールオフ現象を再現することができた。これは、遮蔽効果の電子濃度依存性が原因と考えられる。一方、高垂直電界側では、界面凹凸散乱を考慮していないにもかかわらず、移動度が減少する効果が確認された。これは、電子-電子散乱による分布関数の変調効果が、フォノン散乱移動度に影響したものと考えられる。

最後に、リモートイオン化不純物散乱が極薄ゲート絶縁膜 MOSFET の反転層電子移動度に与える影響を調べた。ゲート絶縁膜の薄膜化に伴い、ゲートリモートイオンによる界面ポテンシャルのゆらぎが反転層移動度の低下をもたらすことを確認した。ただし、移動度が低下し始める酸化膜厚の点において、最近の実験結果との一致は良好とはいえなかった。この原因として (1) 量子効果、特に強反転状態における量子閉じ込めにより電子分布が界面から離れて存在する効果の影響、(2) ゲート電子によるリモートイオンの遮蔽効果の影響、が今回のシミュレーションでは考慮されていなかった点を挙げた。後者をシミュレーションに取り入れるには、陽イオンによる電子捕獲問題を解決する必要がある、この困難は、やはり電子を古典粒子として取り扱う EMC/MD 法の限界からくるものである。量子補正ポテンシャルの導入など、EMC/MD 法への量子効果の反映が今後の課題である。

参考文献

- [1] D.A. Antoniadis, VLSI Symp. Tech. Dig., p. 2, Hawaii, 2002.
- [2] M.S. Krichnan, Y.C. Yeo, Q. Lu, T.-J. King, J. Bokor, and C. Hu, Tech. Dig. IEDM, p. 571, San Francisco, 1998.
- [3] M. S. Krishnan, L. Chang, T.-J. King, J. Bokor, and C. Hu., IEDM Tech. Dig., p. 241, Washington, DC, 1999.
- [4] N. Yang, W. K. Henson, J. R. Hauser, and J. J. Wortman, IEEE Trans. Electron Devices **47**, 440 (2000).
- [5] S. Takagi and M. Takayanagi, Ext. Abst. SSDM, p. 378, Tokyo, 2001.
- [6] E. Conwell and V.P. Weisskopf, Phys. Rev. **77**, 388 (1950).
- [7] H. Brooks, Phys. Rev. **83**, 879 (1951).
- [8] D. Chattopadhyay and H.J. Queisser, Rev. Mod. Phys. **53**, 741 (1981).
- [9] D.L. Rode, in *Semiconductors and Semimetals vol. 10*, edited by R.K. Willardson and A.C. Beer, ch. 1, Academic, New York, 1975.
- [10] M.V. Fischetti, Phys. Rev. B **44**, 5527 (1991).
- [11] C. Jacoboni and P.J. Price, Solid-State Electron. **31**, 649 (1988).
- [12] C. Jacoboni and P. Lugli, *The Monte Carlo Method for Semiconductor Device Simulation*, p.133, Springer-Verlag, Wien, New York, 1989.
- [13] R. P. Joshi and D. K. Ferry, Phys. Rev. B **43**, 9734 (1991).
- [14] M. Moško, V. Cambel, and A. Mosková, Phys. Rev. B **46**, 5012 (1992).
- [15] C.J. Wordelman and U. Ravaioli, IEEE Trans. Electron Devices **47**, 410 (2000).
- [16] W.J. Gross, D. Vasileska, and D.K. Ferry, IEEE Trans. Electron Devices **47**, 1831 (2000).
- [17] I. Kawashima, Y. Kamakura, and K. Taniguchi, Tech. Dig. IEDM, p. 113, San Francisco, 2000.
- [18] T. Kurusu and N. Sano, Physica B **314**, 198 (2002).
- [19] S. Takagi, A. Toriumi, M. Iwase, and H. Tango, IEEE Trans. Electron Devices **41**, 2357 (1994).

- [20] N. Sano, K. Matsuzawa, M. Mukai, and N. Nakayama, IEDM Tech. Dig., p. 275, San Francisco, 2000.
- [21] R.W. Hockney and J.W. Eastwood, *Computer Simulation Using Particles*, IOP Publishing, Bristol, 1988.
- [22] C. Jacoboni and L. Reggiani, Rev. Mod. Phys. **55**, 645 (1983).
- [23] J. Dziewior and D. Silber, Appl. Phys. Lett. **35**, 170 (1979).
- [24] C. Jungemann, B. Heinemann, K. Tittelbach-Helmrich, and B. Meinerzhagen, IEDM Tech. Dig., p. 101, San Francisco, 2000.
- [25] 渡辺 力, 名取 亮, 小国 力監修, Fortran77による数値計算ソフトウェア, p. 258, 丸善, 1989.
- [26] J.M. Ziman, *Principles in the Theory of Solids*, 2nd ed., p. 149, University Press, Cambridge, 1972.
- [27] 阿部 龍蔵, 電気伝導, 第9章, 培風館, 1969.
- [28] M.V. Fischetti and S.E. Laux, J. Appl. Phys. **89**, 1205 (2001).
- [29] L.E. Kay and T.-W. Tang, J. Appl. Phys. **70**, 1475 (1991).
- [30] 小出 昭一郎, 量子力学 (I), 第5章, 裳華房, 1969.
- [31] R.P. Feynman, R.B. Leighton, and M. Sands, *The Feynman Lectures on Physics*, vol. II, ch. 7, p. 11, Addison-Wesley Publishing Company, Reading, 1964.
- [32] B. H. Lee, L. Kang, W.-J. Qi, R. Nieh, Y. Jeon, K. Onishi, and J. C. Lee, IEDM Tech. Dig., p. 133, Washington, DC, 1999.
- [33] H. Tsuchiya and U. Ravaioli, J. Appl. Phys. **89**, 4023 (2001).
- [34] M. V. Fischetti, J. Appl. Phys. **89**, 1232 (2001).

第6章 結論

本研究では、極微細 MOSFET の解析に威力を発揮するキャリア輸送シミュレーション方式であるフルバンド MC 法とアンサンブル MC/分子動力学法に着目して、これら手法の効率・精度面の改善を加えるとともに、MOSFET 解析に応用することでキャリア伝導やデバイス劣化に関する新たな知見を得た。その具体的内容をまとめると以下ようになる。

第2章では、フルバンド MC シミュレータにおいて、最も計算量を必要とする散乱後の終状態選択手続き部を高速化する手法を提案した。このアルゴリズムは、エネルギー値を与えて波数ベクトルを返す表をあらかじめメモリ上に参照テーブルとして作成しておくことで、両者の対応関係を高速検索することを可能とする。またその際 k 空間を、バレー、立方体、4 面体と階層的に分割することで、必要となるメモリ量の節約を図った。この高速化は、等間隔正方格子にて k 空間を分割したフルバンド MC シミュレータに適用したものであり、特殊なメッシュ形成技術が不要なことも特徴の一つとする。実際に、MC デバイスシミュレーションを実行し、計算時間を評価したところ、従来の解析バンド MC 法と同程度の速度で、フルバンド MC シミュレーションが実行可能であることが分かった。

第3章では、Si 中の高エネルギーホールに対する散乱モデルの精度を、量子生成効率の実験とフルバンド MC シミュレーションの結果を比較することで検証した。1 を超える量子生成効率は、Si 中のホール散乱確率を検証する用途に用いることができ、従来のドリフト速度とイオン化係数のみでは不確定性の強かったフォノン散乱確率とイオン化確率の精度を、より厳しく判定することが可能となった。第一原理的に計算したイオン化確率に基づく散乱モデルが実験値と良い一致を求めたが、一方、RKA をベースにしたモデルでは大きめの量子生成効率が得られた。この結果は、RKA がイオン化率をしきい値近傍で過大評価するという理論的予想を支持するものである。

第4章では、FN および SHE 注入ストレス実験を、酸化膜厚 5 nm の MOSFET を用いて行い、酸化膜絶縁破壊と電子エネルギーの関係を調べた。電子エネルギーの解析には、MC シミュレーションを活用し、(1) 酸化膜絶縁破壊寿命は酸化膜に加わる電界のみの関数では決まらず、同じ酸化膜電界の下でも、注入する電子のエネルギーが高いほど早く劣化が進行すること、(2) ゲート酸化膜内部の陽極側における電子エネルギーが、 Q_{BD} を決定づけること、を明らかにした。陽極側の電子エネルギー、あるいはその指標量である基板ホール電流を比較することにより、注入法やバイアス条件によらず、統一的にゲート酸化膜劣化を解釈することが可能である。

第5章では、EMC/MD 法を用いて、陰イオンと電子が混在した系での低電界電子輸送解析を行い、その妥当性と問題点を評価した。アクセプタイオンをドーブしたバルク Si 中における電子移動度を求めたところ、計算結果には遮蔽効果の影響により電子濃度依存性が現れた。従来より一般的に用いられてきた Brooks-Herring モデルの結果と比較したところ、ファクタで 1.5~2 倍程度低い値が得られ、それは実験値により近かった。両者の計算法の違いには、多重イオン散乱、動的遮蔽や、電子電子散乱によって分布関数の形状が変化する効果、などが考えられるが、これらは全て EMC/MD 法で自動的に考慮することができる。続いて、EMC/MD 法を MOS 反転層電子輸送に応用した。まず、鏡像法による力の計算法や、カットオフ近似を補正するための垂直電界計算法など、必要となるアルゴリズムの整備を行った。応用例として、MOS 反転層移動度の垂直電界依存

性を解析したところ、低垂直電界側で実測される移動度のロールオフ現象を再現することができた。これは、遮蔽効果の電子濃度依存性が原因と考えられる。一方、高垂直電界側では、電子-電子散乱による分布関数の変調効果によって移動度が減少する効果を確認した。最後に、リモートイオン化不純物散乱が極薄ゲート絶縁膜 MOSFET の反転層電子移動度に与える影響を調べた。ゲート絶縁膜の薄膜化に伴い、ゲートリモートイオンによる界面ポテンシャルのゆらぎが反転層移動度の低下をもたらすことを確認した。ただし、移動度が低下し始める酸化膜厚の点において、最近の実験結果との一致は良好とはいえず、この原因として (1) 量子効果、特に強反転状態における量子閉じ込めにより電子分布が界面から離れて存在する効果の影響、(2) ゲート電子によるリモートイオンの遮蔽効果の影響、が考慮されていなかった点を挙げた。後者をシミュレーションに取り入れるには、陽イオンによる電子捕獲問題を解決する必要がある、この困難は、やはり電子を古典粒子として取り扱う EMC/MD 法の限界からくるものである。量子補正ポテンシャルの導入など、EMC/MD 法への量子効果の反映を今後の課題として掲げた。

付 録 A 棄却法による終状態選択法

ここでは、Jungemann ら [1] によって提案されたフルバンド MC シミュレーションにおける散乱後の終状態選択手続きを解説する。なお、これを第 2 章にて解説したデータ構造に対応させるため、田中 [2] による 4 面体探索法を用いる。

A.1 4 面体候補の探索法

まず、散乱後の終状態を含み得る 4 面体候補の効率的探索法を説明する [2]。この際の条件にはエネルギー保存則のみを考え、非弾性散乱によるエネルギーの授受は高々 $\hbar\omega_{\max}$ だとする。図 A.1 (a) のように、各 4 面体内部のエネルギー最大値 $E_{\max}$ と最小値 $E_{\min}$ を $E_{\max}-E_{\min}$ 平面上にプロットする。ここで、1 つ 1 つの 4 面体は点で表されている。初期エネルギー E_{ini} の電子が、非弾性散乱後に有している可能性のあるエネルギー値の上限、下限はそれぞれ、 $E_{\text{ini}} + \hbar\omega_{\max}$, $E_{\text{ini}} - \hbar\omega_{\max}$ である。この範囲のエネルギー値を含む 4 面体は $E_{\max}-E_{\min}$ 平面上では、

$$E_{\text{ini}} + \hbar\omega_{\max} < E_{\min} \quad (\text{A.1})$$

$$E_{\text{ini}} - \hbar\omega_{\max} > E_{\max} \quad (\text{A.2})$$

$$E_{\max} > E_{\min} \quad (\text{A.3})$$

の範囲、すなわち図中の灰色の領域に存在する。

プログラム中では、この表を図 A.1 (b) のような 2 次元配列に格納する。 $E_{\max}-E_{\min}$ 平面を離散化し、図 A.1 (a) において 4 面体を含んでいる格子範囲（図中太枠）をカバーするように [NEMIN][NEMAX] の領域を決定する。各格子には、それに含まれる 4 面体番号（複数）を予め格納しておく。すると、図中の黄色の領域内のメッシュを参照していけば、非弾性散乱後状態の候補となりうる 4 面体を高速に探索することができる。

A.2 終状態 4 面体の選択法

A.1 節でリストアップした 4 面体候補の中から 1 つを棄却法により決定する [1]。

始状態を含む 4 面体番号を t 、また終状態 4 面体番号を t' とし、その候補の数を N とする。 N 個の t' の中から 1 つを選択する際考慮すべき重みは、 $M(t, t')D_{t'}(E')$ と一般的に表すことができる。ここで、 $M(t, t')$ は散乱行列要素、 $D_{t'}(E')$ は、終状態 4 面体 t' に含まれる終状態エネルギー E' の状態密度である。なお、 E' は、一般的に次のように表される。

$$E' = E_{\text{ini}} + \hbar\omega(t, t') \quad (\text{A.4})$$

ここで、 $\hbar\omega(t, t')$ は、非弾性散乱によるエネルギー変化量である。

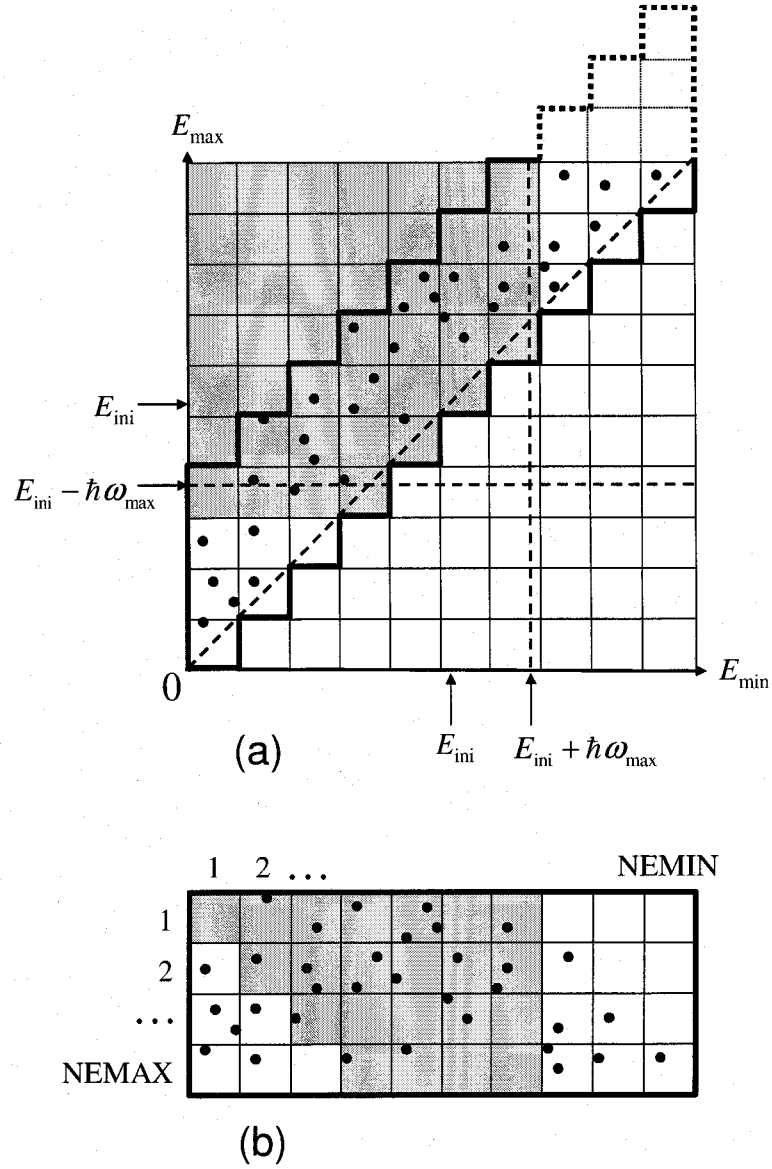


図 A.1: 範囲 $[E - \hbar\omega_{\max}, E + \hbar\omega_{\max}]$ 内のエネルギー値を持つ状態を含んだ 4 面体を高速検索するための表.
 (a) 各 4 面体内部のエネルギー最大値 $E_{\max}$ と最小値 $E_{\min}$ をそれぞれ横軸と縦軸にとり平面上にプロットしたもの. 図中の点が個々の 4 面体を表している. 各エネルギー軸を離散化し, 平面をセルに分割している. 初期エネルギー E_{ini} の電子が非弾性散乱後取る可能性のあるエネルギー値の上限, 下限がそれぞれ, $E_{\text{ini}} + \hbar\omega_{\max}$, $E_{\text{ini}} - \hbar\omega_{\max}$ であったとする. この範囲のエネルギー値を含む 4 面体は $E_{\max}$ - $E_{\min}$ 平面上で, 図中の灰色で塗りつぶした領域内に存在する. (b) プログラム中で (a) の表を実現する際, 用意すべき 2 次元配列の構造. (a) の図中において太線で囲んだ領域を, 2 次元配列化している. 各セルには個数不特定の複数の 4 面体番号が含まれる. 各配列要素には, 各セルに属する 4 面体番号の線形リストへのポインタを記憶させる. 灰色で塗りつぶした要素に含まれる線形リストを全て走査することで, 候補 4 面体の高速検索ができる.

棄却法を用いると、この重みを、膨大な数となる t' 全てについて計算する必要はない。図 A.2 にその原理を示す。まず、1 から N までの (整数) 乱数 r_1 を振って、 t' を仮に決める。次に、その t' に関して $M(t, t') D_{t'}(E')$ を計算し、あらかじめ見積もっておいたその最大値との比をとる。そして、0 から 1 までの実数値の乱数 r_2 を振って、もしその値が先に計算した比の値よりも小さいならば、その t' を正式な終状態 4 面体として採用、もしそうでないならば、その t' は棄却とし、以上の手続きを繰り返す。

注意点であるが、図 A.2 に示した重み分布が、非一様であるのなら、棄却数が増大し、計算時間の増加につながる事が挙げられる。また、 $M(t, t') D_{t'}(E')$ の最大値を、不必要に大きくとりすぎて、計算の非効率化につながるため、それをどのように見積もるかについても、工夫が必要などころである。しかしながら、本手法は、非弾性散乱を高精度に取り入れることができ、また同時に高速性も兼ね備えており、非常に優れたアルゴリズムといえる。

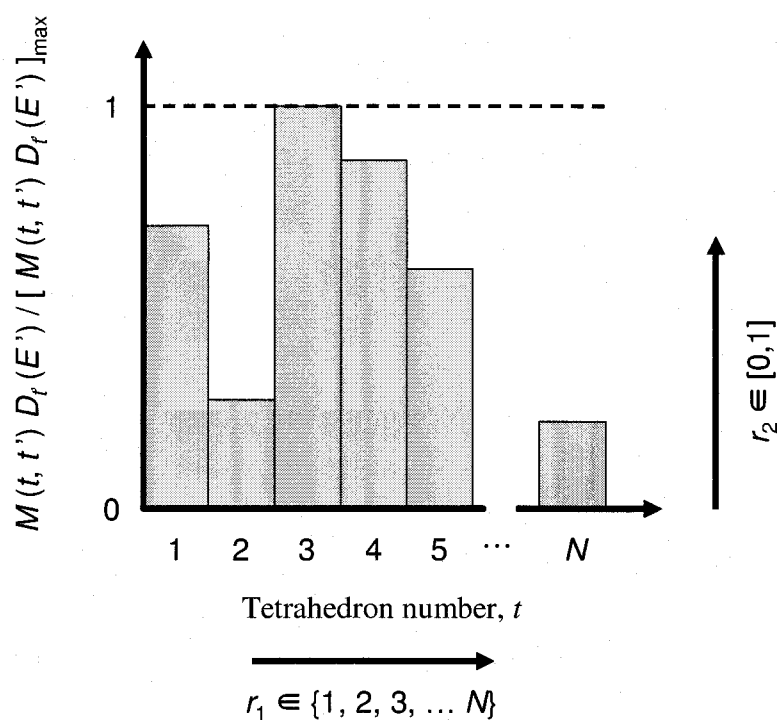


図 A.2: 棄却法による 4 面体選択法の説明図。

参考文献

- [1] C. Jungemann, S. Yamaguchi, and H. Goto, Proc. 26th European Solid State Device Research Conference, p. 821, Bologna, 1996.
- [2] 田中 克彦, 私信, 1995.

付 録 B イオン化不純物散乱により律速される電子移動度の解析的導出法

Brooks-Herring(BH) モデルをもちいて、イオン化不純物散乱により律速される電子移動度を解析的に導出する [1, 2]. BH 理論では、電子が感ずるイオン化不純物からのポテンシャルとして、湯川型のポテンシャル：

$$\phi(\mathbf{r}) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_{\text{Si}}} \frac{1}{r} e^{-q_s r} \quad (\text{B.1})$$

を仮定する．ここで、指数関数因子 $e^{-q_s r}$ は、イオン化不純物の周りに存在する自由キャリアが再分布することによって、イオンのポテンシャルの影響が遠方まで及ばなくなる効果 (遮蔽効果) を表している．遮蔽パラメータ q_s は、古典統計に従う電子気体を想定した Debye-Hückel モデルによると、電子濃度 n の関数として次のように与えられる．

$$q_s = \sqrt{\frac{e^2 n}{\epsilon_{\text{Si}} k_B T}} \quad (\text{B.2})$$

散乱ポテンシャル H' として、結晶中に含まれる全イオン化不純物のポテンシャルを足し上げた $\sum_{\alpha} \phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{\alpha})$ を考え、波数 $\mathbf{k}$ の平面波から $\mathbf{k}'$ の平面波への遷移確率 $P(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ を、次の Fermi 黄金則から計算する．

$$P(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \mathbf{k}' | H' | \mathbf{k} \rangle|^2 \delta(E' - E) \quad (\text{B.3})$$

行列要素を計算すると、

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}' | H' | \mathbf{k} \rangle &= \int d^3r \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} \sum_{\alpha} \phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{\alpha}) \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \\ &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_{\text{Si}} V} \sum_{\alpha} \int d^3r \frac{e^{-q_s |\mathbf{r} - \mathbf{R}_{\alpha}|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_{\alpha}|} e^{-i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}} \\ &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_{\text{Si}} V} \sum_{\alpha} \int d^3r' \frac{e^{-q_s |\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}'|} e^{-i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}' + \mathbf{R}_{\alpha})} \\ &= \frac{e^2}{i\epsilon_{\text{Si}} V} \frac{1}{q^2 + q_s^2} \sum_{\alpha} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_{\alpha}} \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

となる．ここで、 $\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$ とおいた．上式の中に現れた因子 $\rho_{\mathbf{q}} = \sum_{\alpha} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_{\alpha}}$ に対して、不純物原子間の位置には相関が無く、完全にランダムな分布をすると仮定し、5.2.2 節と同様の近似をほどこす．

$$\langle |\rho_{\mathbf{q}}|^2 \rangle \simeq NV \quad (\text{B.5})$$

運動量緩和時間 τ は、 $\mathbf{k}'$ と $\mathbf{k}$ の間の散乱角を θ として、

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau_{\text{imp}}(E)} &= \sum_{\mathbf{k}'} P(\mathbf{k}, \mathbf{k}') (1 - \cos \theta) \\ &= \frac{Ne^4}{16\sqrt{2}\pi\epsilon_{\text{Si}}^2 m^{*1/2}} E^{-3/2} (1 + \alpha E)^{-2} (1 + 2\alpha E) \left[\log(1 + b) - \frac{b}{1 + b} \right] \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

と与えられる。ここで、 $b = 4(k/q_s)^2$ とおいた。また、エネルギーバンド構造を簡単のため、状態密度有効質量 $m^* = 0.32m_0$ (m_0 は自由電子質量) を用いて、等方的な形 $E(1 + \alpha E) = \hbar^2 k^2 / (2m^*)$ で表した [3]。

移動度 μ は、Kubo-Greenwood の式 [3] より次式で計算することができる。

$$\mu = \frac{2e}{3} \frac{\int_0^\infty dE D(E) E \tau(E) m_c(E)^{-1} \frac{\partial f_0}{\partial E_F}}{\int_0^\infty dE D(E) f_0(E)} \quad (\text{B.7})$$

ここで、 $m_c(E) = m^*(1 + 2\alpha E)$ はエネルギー依存性を考慮した伝導有効質量、 E_F は Fermi エネルギー、 $f_0(E)$ は分布関数で、Boltzmann 分布を仮定した。第 5 章にて、BH 理論による移動度として示したデータは、この式を数値積分することによって計算した。

最後に、参考のため、いくつかの近似を施して、移動度を n の関数として見通しの良い形に整理する [1]。状態密度は非放物線性を考慮せず $E^{1/2}$ に比例すると仮定する。 $b \gg 1$ の場合を考えると

$$\log(1 + b) - \frac{b}{1 + b} \simeq \log b \quad (\text{B.8})$$

と近似できる。さらに、 $\log b$ を積分の外にはずす。すると分子の被積分関数は定数倍を除いて $E^3 \exp(-E/k_B T)$ となる。これは、 $E = 3k_B T$ で極大値をとり、 $E \rightarrow 0$ 、あるいは ∞ のとき 0 に収束する関数であるので、 $\log b$ を $E = 3k_B T$ の時に取る値で代表させる。すると、BH 理論による移動度 μ_{BH} が、電子濃度 n の関数として以下の式で表される。

$$\mu_{\text{BH}} = \frac{128\sqrt{2}\pi^{1/2}\varepsilon_{\text{Si}}^2(k_B T)^{3/2}}{m^{*1/2}N_A e^3} \left[\ln \frac{24m^*\varepsilon_{\text{Si}}(k_B T)^2}{ne^2\hbar^2} \right]^{-1} \quad (\text{B.9})$$

参考文献

- [1] D. Chattopadhyay and H.J. Queisser, Rev. Mod. Phys. **53**, 741 (1981).
- [2] 阿部 龍藏, 電気伝導, 第 9 章, 培風館, 1969.
- [3] M.V. Fischetti, Phys. Rev. B **44**, 5527 (1991).

謝辞

本研究を遂行し本論文を作成するにあたり、終始懇切なる御指導、御鞭撻を賜りました大阪大学大学院工学研究科電子情報エネルギー工学専攻 谷口研二教授に心より厚く御礼申し上げます。

本論文の作成にあたり、懇篤なる御指導を賜りました大阪大学大学院工学研究科精密科学専攻 森田瑞穂教授、大阪大学サイバーメディアセンターコンピュータ実験科学研究部門 小田中紳二教授、大阪大学大学院工学研究科電子工学専攻 森伸也助教授に厚く御礼申し上げます。

本論文に対して御検討、御教示を賜りました大阪大学大学院工学研究科電子情報エネルギー工学専攻 北山研一教授、谷野哲三教授、原晋介助教授に厚く御礼申し上げます。

著者が大阪大学に在学中、本研究の機会を与えて下さり、その後も終始御指導、御鞭撻を賜りました濱口智尋大阪大学名誉教授に衷心より御礼申し上げます。

著者が日本電気株式会社に在籍中、本研究の機会を与えて下さり、貴重な御助言と温かい激励を賜りました日本電気株式会社 渡辺久恒博士、阿部浩之博士(現 株式会社液晶先端技術開発センター)、福岡雅夫博士、國尾武光博士、加藤治男氏(現 NEC エレクトロニクス株式会社)、松本比呂志博士(現 NEC エレクトロニクス株式会社)に深く御礼申し上げます。

本研究の過程において、貴重な御助言と御議論を頂いた大阪大学大学院工学研究科 松岡俊匡講師、森藤正人講師、百瀬英毅助手、久保等技官に感謝申し上げます。また、事務的な面で御支援を頂いた古田典子秘書、小平泰子秘書、野村友子秘書に感謝致します。

筆者が大阪大学に在学中、フルバンドモンテカルロシミュレータ用高精度散乱確率計算の研究過程で有益な御助言と御議論を頂いた株式会社ルネサステクノロジ 國清辰也氏、シャープ株式会社 竹中正浩氏、水野弘之博士(現 株式会社日立製作所)、富士通株式会社 山口清一郎氏、山地充氏(現 富士通株式会社)に感謝申し上げます。

筆者が日本電気株式会社に在籍中、本論文第2,3章で述べたフルバンドモンテカルロシミュレータの研究過程で多くの貴重な御助言と御議論を頂いた日本電気株式会社 飯塚貴弘氏(現 NEC エレクトロニクス株式会社)に感謝申し上げます。また、探索アルゴリズムに関するアイデアを御助言頂いた田中克彦氏、モンテカルロデバイスシミュレータを開発しシミュレーション結果を提供して頂いた重田一樹氏(現 NEC エレクトロニクス株式会社)、株式会社 NEC 情報システムズ 山本佳史博士、ホール散乱モデル構築に際し御助言頂いた日本電気株式会社 竹内潔博士、電気測定技術を御指導頂いた山本豊二氏に感謝致します。

本論文第3章で述べたインパクトイオン化量子生成効率について、実験データを御提供頂くとともに、貴重な御助言を頂いた株式会社東芝 高木信一博士に感謝申し上げます。また、シミュレーション方法に関し御助言頂いた筑波大学 佐野伸行助教授、ST Microelectronics, Andrea Ghetti 博士、IBM, Massimo V. Fischetti 博士に感謝致します。

本論文第4章で述べたゲート酸化膜信頼性の研究過程において、実験データを御提供頂くとともに、酸化膜絶縁破壊および電気伝導機構に関する活発な御議論を頂いた富田孝之氏(現 株式会社村田製作所)、宇都宮裕人氏(現 株式会社日立製作所)、松下電気産業株式会社 岡田健治博士、桜俊幸氏(現 アジレント・テクノロジー株式会社)、石田明寛氏(現 ソニー株式会社)、岩田亮氏、宇野重

康博士 (現 日立ケンブリッジ研究所), 出口和亮氏 (現 株式会社ルネサステクノロジ), Pascal Lo Ré 氏 (現 シャープ株式会社), 中辻広志氏, 細井卓治氏, 酒井敦氏, 久保田圭氏, 谷藤亮氏, 森川周一氏に感謝致します。また, 酸化膜劣化モデルに対し御助言頂いた株式会社ルネサステクノロジ 上野修一氏, ゲート酸化膜への電子注入モデルに対し御議論頂いた日本電気株式会社 江崎達也博士に感謝申し上げます。

本論文第5章で述べたアンサンブルモンテカルロシミュレータを開発し, シミュレーション結果を提供して頂いた川島一郎氏 (現 松下電器産業株式会社), 領家弘典氏に感謝致します。

筆者が, 大阪大学在学中に所属した工学研究科電子工学専攻 濱口研究室, 日本電気株式会社が籍中に所属したマイクロエレクトロニクス研究所 超高集積回路研究部, および現所属の大阪大学大学院工学研究科電子情報エネルギー工学専攻 谷口研究室の関係者の皆様には, 本研究遂行にあたって多くの御協力と温かい励ましを頂きました。ここに感謝申し上げます。

本論文には, 半導体理工学センター (STARC) からの援助並びに試料提供により遂行された実験結果, 計算結果が含まれています。また, 本研究を行うにあたり STARC 研究員の皆様から頂いた多くの貴重な御助言に感謝致します。

本研究の一部は, 文部科学省科学研究費奨励研究 (A) から支援を頂きました。

最後に, 筆者が本研究を遂行するにあたり, 支援と激励を頂いた両親と弟に感謝します。

研究業績

論文

1. T. Kunikiyo, M. Takenaka, Y. Kamakura, M. Yamaji, H. Mizuno, M. Morifuji, K. Taniguchi, and C. Hamaguchi, "A Monte Carlo Simulation of Anisotropic Electron Transport in Silicon Including Full Band Structure and Anisotropic Impact-Ionization Model," *J. Appl. Phys.*, vol. 75, no. 1, pp. 297–312, 1994.
2. Y. Kamakura, H. Mizuno, M. Yamaji, M. Morifuji, K. Taniguchi, C. Hamaguchi, T. Kunikiyo, and M. Takenaka, "Impact Ionization Model for Full Band Monte Carlo Simulation," *J. Appl. Phys.*, vol. 75, no. 7, pp. 3500–3506, 1994.
3. A. Abramo, L. Baudry, R. Brunetti, R. Castagne, M. Charef, F. Dessenne, P. Dollfus, R. Dutton, W.L. Engl, R. Fauquembergue, C. Fiegna, M.V. Fischetti, S. Galdin, N. Goldsman, M. Hackel, C. Hamaguchi, K. Hess, K. Hennacy, P. Hesto, J.M. Higman, T. Iizuka, C. Jungemann, Y. Kamakura, H. Kosina, T. Kunikiyo, S.E. Laux, H. Lin, C. Maziar, H. Mizuno, H.J. Peifer, S. Ramaswamy, N. Sano, P.G. Scrobohaci, S. Selberherr, M. Takenaka, T.-W. Tang, K. Taniguchi, J.L. Thobel, R. Thoma, K. Tomizawa, M. Tomizawa, T. Vogelsang, S.-L. Wang, X. Wang, C.-S. Yao, P.D. Yoder, and A. Yoshii, "A Comparison of Numerical Solutions of the Boltzmann Transport Equations for High-Energy Electron Transport in Silicon," *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 41, no. 9, pp. 1646–1654, 1994.
4. T. Tomita, Y. Kamakura, K. Taniguchi, "Energy Relaxation Length for Ballistic Electron Transport in SiO₂," *Physica Status Solidi (b)*, vol. 204, no. 1, pp. 129–132, 1997.
5. T. Tomita, H. Utsunomiya, Y. Kamakura, K. Taniguchi, "Hot Hole Induced Breakdown of Thin Silicon Dioxide Films," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 71, no. 25, pp. 3664–3666, 1997.
6. 宮川 修一, 金 良守, 白樫 淳一, 谷口 研二, 松本 和彦, 鎌倉 良成, "SPM 超微細酸化法を用いた単一電子デバイスの作成," 電子情報通信学会論文誌 C-II, vol. J81-C-II, no. 3, pp. 285–290, 1998.
7. 中野 浩之, 深谷 恭太, 坂本 卓也, 鎌倉 良成, 谷口 研二, "赤外分光エリプソメトリを用いたキャリア濃度分布評価アルゴリズム," 電子情報通信学会論文誌 C-I, vol. J81-C-I, no. 5, pp. 290–291, 1998.
8. J. Xia, T. Saito, T. Aoki, Y. Kamakura, and K. Taniguchi, "Boron Accumulation in the {311} Defect Region Induced by Self-Implantation into Silicon Substrate," *Jpn. J. Appl. Phys.*, vol. 37, no. 8A, pp. L913–915, 1998.
9. T. Tomita, H. Utsunomiya, T. Sakura, Y. Kamakura, and K. Taniguchi, "A New Soft Breakdown Model for Thin Thermal SiO₂ Films Under Constant Current Stress," *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 46, no. 1, pp. 159–164, 1999.
10. Y. Kamakura, A. Ishida, and K. Taniguchi, "Monte Carlo Simulation of Hot-Electron Induced

- Dielectric Breakdown in Thin Silicon Dioxide Films," *Physica B*, vol. 272, no. 1-4, pp. 532-534, 1999.
11. J. Xia, T. Saito, R. Kim, T. Aoki, Y. Kamakura, and K. Taniguchi, "Studies of Boron Segregation to {311} Defects in Silicon-Implanted Silicon," *Jpn. J. Appl. Phys.*, vol. 38, pt. 1, no. 4B, pp. 2319-2323, 1999.
 12. J. Xia, T. Saito, R. Kim, T. Aoki, Y. Kamakura, and Kenji Taniguchi, "Boron segregation to extended defects induced by self-ion implantation into silicon," *J. Appl. Phys.*, vol. 85, no. 11, pp. 7597-7603, 1999.
 13. 斎藤 朋也, 夏 建新, 金 良守, 青木 丈典, 小林 弘幸, 古田 善一, 鎌倉 良成, 谷口 研二, "低温熱処理におけるボロンの初期増速拡散," 電子情報通信学会論文誌 C, vol. J82-C-II, no. 8, pp. 446-450, 1999.
 14. 小林 弘幸, 夏 建新, 斎藤 朋也, 金 良守, 鎌倉 良成, 谷口 研二, "シリコン中の {311} 欠陥へのボロンの析出: 第1原理計算に基づく検証," 電子情報通信学会論文誌 C, vol. J83-C, no. 7, pp. 632-635, 2000.
 15. 古田 善一, 金 良守, 夏 建新, 青木 丈典, 斎藤 朋也, 鎌倉 良成, 谷口 研二, "低エネルギー注入ボロンの低温熱処理時におけるキンク濃度の解析," 電子情報通信学会論文誌 C, vol. J83-C, no. 8, pp. 731-735, 2000.
 16. 斎藤 朋也, 夏 建新, 金 良守, 青木 丈典, 古田 善一, 鎌倉 良成, 小林 弘幸, 谷口 研二, "ボロンの過渡拡散におけるバックグラウンド炭素濃度依存性," 電子情報通信学会論文誌 C, vol. J83-C, no. 8, pp. 744-748, 2000.
 17. K. Deguchi, A. Ishida, S. Uno, Y. Kamakura, and K. Taniguchi, "Degradation of Direct-Tunneling Gate Oxide under Hot-Hole Injection," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 77, no. 9, pp. 1384-1386, 2000.
 18. Y. Kamakura, I. Kawashima, K. Deguchi, and K. Taniguchi, "Verification of Hot Hole Scattering Rates in Silicon by Quantum-Yield Experiment," *J. Appl. Phys.*, vol. 88, no. 10, pp. 5802-5809, 2000.
 19. 鎌倉 良成, 出口 和亮, 石田 明寛, 宇野 重康, 谷口 研二, "ホットホール注入によるトンネルゲート酸化膜の絶縁性劣化," 電気学会 電子情報システム部門誌, vol. 121-C, no. 3, pp. 492-498, 2001.
 20. S. Uno, A. Ishida, K. Deguchi, Y. Kamakura, and K. Taniguchi, "Carrier Separation Measurement of Leakage Current under Prebreakdown in Ultrathin SiO₂ Films," *J. Appl. Phys.*, vol. 89, no. 12, pp. 8336-8338, 2001.
 21. T. Watanabe, M. Irie, T. Teraji, T. Ito, Y. Kamakura, K. Taniguchi, "Impact Excitation of Carriers in Diamond under Extremely High Electric Fields," *Jpn. J. Appl. Phys.*, vol. 40, pt. 2, no. 7B, pp. L715-L717, 2001.
 22. A. Sakai, A. Ishida, S. Uno, Y. Kamakura, M. Morifuji, and K. Taniguchi, "Calculation of Direct Tunneling Current through Ultra-Thin Gate Oxides Using Complex Band Structure Models for SiO₂," *Journal of Computational Electronics*, vol. 1, issue 1-2, pp. 195-199, 2002.
 23. S. Uno, K. Deguchi, Y. Kamakura, and K. Taniguchi, "Trap Density Dependent Inelastic Tunneling in Stress-Induced Leakage Current," *Jpn. J. Appl. Phys.*, vol. 41, pt. 1, no. 4B, pp. 2645-2649, 2002.
 24. H. Tsuji, R. Kim, T. Hirose, T. Shano, Y. Kamakura, and K. Taniguchi, "Photoluminescence

- study of {311} defect-precursors in self-implanted silicon," *Materials Science and Engineering B*, vol. 91-92, pp. 43-45, 2002.
25. H. Tsuji, R. Kim, T. Hirose, T. Shano, Y. Kamakura, and K. Taniguchi, "Atomic configuration study of implanted F in Si based on experimental evidences and ab initio calculations," *Materials Science and Engineering B*, vol. 91-92, pp. 148-151, 2002.
 26. Y. Kamakura, H. Ryouke, and K. Taniguchi, "Ensemble Monte Carlo/Molecular Dynamics Simulation of Inversion Layer Mobility in Si MOSFETs — Effects of Substrate Impurity," *IEICE Trans. Electron.*, vol. E86-C, no. 3, pp. 357-362, 2003.
 27. 宇野 重康, 石田 明寛, 鎌倉 良成, 谷口 研二, "極薄シリコン酸化膜における Pre-Breakdown 現象のキャリアセパレーション法による解析," 電子情報通信学会論文誌, vol. J86-C, no.4, pp. 457-466, 2003.
 28. T. Kunikiyo, K. Ishikawa, Y. Inoue, Y. Kamakura, K. Taniguchi, N. Kotani, "Model of hole-initiated impact-ionization rate in alpha-quartz for a full band Monte Carlo simulation," *J. Appl. Phys.*, vol. 94, no. 2, pp. 1096-1104, 2003.

国際会議

1. K. Taniguchi, H. Mizuno, M. Morifuji, Y. Kamakura, M. Yamaji, C. Hamaguchi, T. Kunikiyo, and M. Takenaka, "Physical Models for Rigorous Monte Carlo Simulation," The 2nd International Conference & Exhibition on Computer Applications to Materials and Molecular Science and Engineering (September 22-25, 1992) Yokohama, Japan.
2. K. Taniguchi, T. Kunikiyo, H. Mizuno, M. Takenaka, Y. Kamakura, and C. Hamaguchi, "Adjustable parameter free Monte Carlo simulation for high field carrier transport," Symp. on Semiconductor Modeling & Simulation (March 6-7, 1993) Taipei, Taiwan.
3. T. Kunikiyo, Y. Kamakura, M. Yamaji, H. Mizuno, M. Takenaka, K. Taniguchi, and C. Hamaguchi, "Adjustable Parameter Free Monte Carlo Simulation for Electron Transport in Silicon Including Full Band Structure," International workshop on VLSI process and device modeling (May14-15, 1993) Nara, Japan.
4. K. Taniguchi, H. Mizuno, Y. Kamakura, M. Morifuji, C. Hamaguchi, T. Kunikiyo, and M. Takenaka, "High Field Carrier Transport using a Monte Carlo Simulator including Realistic Band Structure," International workshop on process and devices of scales LSI's (June 24-25, 1993) Seoul, Korea.
5. K. Taniguchi, H. Mizuno, Y. Kamakura, C. Hamaguchi, and T. Kunikiyo, "Study of Anisotropic Electron Transport in Silicon Using ab-initio Monte Carlo Simulation," International semiconductor device research symposium (December 1-3, 1993) Charlottesville, USA.
6. K. Taniguchi, T. Kunikiyo, Y. Kamakura, H. Mizuno, and C. Hamaguchi, "Simulation of high field carrier transport in silicon," International Conference on Advanced Microelectronic Devices and Processing (March 3-5, 1994) Sendai, Japan.
7. K. Taniguchi, M. Yamaji, T. Kunikiyo, Y. Kamakura, M. Takenaka, M. Morifuji, K. Sonoda, and C. Hamaguchi, "Monte Carlo Simulation of Impact Ionization Processes in Silicon," 3rd International Workshop on Computational Electronics (May 18-20, 1994) Portland, U.S.A.
8. J. Bude, T. Iizuka, and Y. Kamakura, "Determination of Threshold Energy for Hot Electron

- Interface State Generation," International Electron Devices Meeting (December 8–11, 1996) San Francisco, U.S.A.
9. T. Tomita, Y. Kamakura, and K. Taniguchi, "Energy Relaxation Length for Ballistic Electron Transport in SiO₂," International Conference on Nonequilibrium Carrier Dynamics in Semiconductors (July 28–August 1, 1997) Berlin, Germany.
 10. T. Sakamoto, H. Nakano, Y. Kamakura, and K. Taniguchi, "New Nondestructive Carrier Profiling for Ion IMplanted Si using Infrared Spectroscopic Ellipsometry," International Conference on Solid State Devices and Materials (September 16–19, 1997) Hamamatsu.
 11. Y. Kamakura, H. Utsunomiya, T. Tomita, K. Umeda, and K. Taniguchi, "Investigations of Hot-Carrier-Induced Breakdown of Thin Oxides," International Electron Devices Meeting (December 7–10, 1997) Washington, D.C., U.S.A.
 12. J. Xia, T. Saito, R. Kim, T. Aoki, Y. Kamakura, and K. Taniguchi, "Boron segregation to {311} defects induced by self-implantation damage in Si," International Conference on Solid State Devices and Materials (September 7–10, 1998) Hiroshima, Japan.
 13. Y. Kamakura and K. Taniguchi, "Verification of Hole Scattering Rates in Si with Quantum Yield Experiment," 6th International Workshop on Computational Electronics (October 19–21, 1998) Osaka, Japan.
 14. T. Sakura, H. Utsunomiya, Y. Kamakura, and K. Taniguchi, "A Detailed Study of Soft- and Pre-Soft-Breakdowns in Small Geometry MOS Structures," International Electron Devices Meeting (December 6–9, 1998) San Francisco, U.S.A.
 15. T. Saito, J. Xia, R. Kim, T. Aoki, H. Kobayashi, Y. Kamakura, and K. Taniguchi, "Experiments and modeling of boron segregation to {311} defects and initial rapid enhanced boron diffusion induced by self-implantation in Si," International Electron Devices Meeting (December 6–9, 1998) San Francisco, U.S.A.
 16. T. Sakura, Y. Kamakura, and K. Taniguchi, "Soft Breakdown in Thin Oxide Films and Its Impact on Reliability of Flash Memories," International Symposium on Future of Intellectual Integrated Electronics (March 14–17, 1999) Sendai, Japan.
 17. K. Taniguchi, T. Saito, J. Xia, R. Kim, T. Aoki, H. Kobayashi, and Y. Kamakura, "Dopant segregation to {311} defects during low temperature annealing," Material Research Society 1999 Spring Meeting (April 6–9, 1999) San Francisco, U.S.A.
 18. Y. Kamakura, A. Ishida, and K. Taniguchi, "Monte Carlo Simulation of Hot-Electron-Induced Dielectric Breakdown in Thin Silicon Dioxide Films," The 11th International Conference on Nonequilibrium Carrier Dynamics in Semiconductors (July 19–23, 1999) Kyoto, Japan.
 19. S. Uno, Y. Kamakura, K. Okada, and K. Taniguchi, "Statistical Monte Carlo Simulation for Dielectric Breakdown of Oxide Thin Films: Effect of Non-Uniformity of Electron Trap Generation," International Conference on Simulation of Semiconductor Process and Devices (September 6–8, 1999) Kyoto, Japan.
 20. Y. Kamakura, T. Sakura, K. Okada, S. Uno, A. Ishida, K. Deguchi and K. Taniguchi, "Temperature Dependence of Current-Voltage Characteristics of SiO₂ Thin Films after Soft Breakdown," 1st international workshop on dielectric thin films for future ULSI devices: Science and Technology (November 1–2, 1999) Tokyo, Japan.
 21. S. Uno, A. Ishida, K. Okada, T. Sakura, K. Deguchi, Y. Kamakura, and K. Taniguchi,

- "A Study of Trap Profiles in Thin Silicon Dioxide Films at Dielectric Breakdown Using Percolation Model," Material Research Society 1999 Fall Meeting (November 29–December 1, 1999) Boston, U.S.A.
22. S. Uno, T. Sakura, Y. Kamakura, and K. Taniguchi, "I-V characteristics of Ultra Thin Oxide Films after Soft Breakdown," 30th IEEE semiconductor interface specialist conference (December 2–4, 1999) Chaleston, U.S.A.
 23. Y. Kamakura, I. Kawashima, K. Deguchi, and K. Taniguchi, "Monte Carlo Simulation of Quantum Yields Exceeding Unity as a Probe of High Energy Hole Scattering Rates in Si," International Electron Devices Meeting (December 5–8, 1999) Washington, D.C., U.S.A.
 24. R. Kim, T. Aoki, Y. Furuta, H. Kobayashi, J. Xia, T. Saito, Y. Kamakura, and K. Taniguchi, "Transient enhanced diffusion of arsenic by self-implantation," Material Research Society 2000 Spring Meeting (April 24–27, 2000) San Francisco, U.S.A.
 25. I. Kawashima, Y. Kamakura, and K. Taniguchi, "Ensemble Monte Carlo/Molecular Dynamics Simulation of Gate Remote Charge Effects in Small Geometry MOSFETs," International Electron Devices Meeting (December 10–13, 2000) San Francisco, U.S.A.
 26. K. Deguchi, S. Uno, A. Ishida, T. Hirose, Y. Kamakura, and K. Taniguchi, "Degradation of Ultra-Thin Gate Oxides Accompanied by Hole Direct Tunneling: Can We Keep Long-Term Reliability of p-MOSFETs?," International Electron Devices Meeting (December 10–13, 2000) San Francisco, U.S.A.
 27. T. Hirose, T. Shano, R. Kim, H. Tsuji, Y. Kamakura, and Kenji Taniguchi, "Atomic configuration study of implanted F in Si based on experimental evidence and ab initio calculations," 9th International Conference on Defects-Recognition, Imaging and Physics in Semiconductors (September 24–28, 2001) Rimini, Italy.
 28. H. Tsuji, R. Kim, T. Hirose, T. Shano, Y. Kamakura, and K. Taniguchi, "Photoluminescence study of {311} defect-precursors in self-implanted silicon," 9th International Conference on Defects-Recognition, Imaging and Physics in Semiconductors (September 24–28, 2001) Rimini, Italy.
 29. Y. Kamakura, K. Deguchi, and K. Taniguchi, "Analysis of Hot-Carrier-Induced Oxide Degradation in MOSFETs by Means of Full-Band Monte Carlo Simulation," International Conference on Simulation of Semiconductor Device and Processes (September 5–7, 2001) Athene, Greece.
 30. S. Uno, K. Deguchi, Y. Kamakura, and K. Taniguchi, "Trap Density Dependent Inelastic Tunneling in Stress-Induced Leakage Current," International Conference on Solid State Devices and Materials (September 26–28, 2001) Tokyo, Japan.
 31. A. Sakai, A. Ishida, S. Uno, Y. Kamakura, M. Morifuji, and K. Taniguchi, "Calculation of Direct Tunneling Current Through Ultra-Thin Gate Oxides Using Complex Band Structure Models for SiO₂," 8th International Workshop on Computational Electronics (October 15–18, 2001) Univ. of Illinois, U.S.A.
 32. Y. Kamakura, H. Ryouke, and K. Taniguchi, "Ensemble Monte Carlo/Molecular Dynamics Simulation of Inversion Layer Mobility in Si MOSFETs — Effects of Substrate Impurity," International Conference on Simulation of Semiconductor Device and Processes (September 4–6, 2002) Kobe, Japan.
 33. T. Hosoi, S. Uno, Y. Kamakura, and K. Taniguchi, "Voltage Acceleration of Ultra-Thin

Gate Oxide Degradation before and after Soft Breakdown,” International Conference on Solid State Devices and Materials (September 17–19, 2002) Nagoya, Japan.

34. T. Hosoi, P. Lo Ré, Y. Kamakura, and K. Taniguchi, “A New Model of Time Evolution of Gate Leakage Current after Soft Breakdown in Ultra-Thin Gate Oxides,” International Electron Devices Meeting (December 8–11, 2002) San Francisco, U.S.A.
35. H. Nakatsuji, Y. Kamakura, and K. Taniguchi, “A Study of Subband Structure and Transport of Two-Dimensional Holes in Strained Si p-MOSFETs Using Full-Band Modeling,” International Electron Devices Meeting (December 8–11, 2002) San Francisco, U.S.A.
36. H. Nakatsuji, Y. Kamakura, and K. Taniguchi, “Full Band Monte Carlo Study for Two-Dimensional Hole Transport in Strained Si p-MOSFETs,” 9th International Workshop on Computational Electronics (May 25–27, 2003) Rome, Italy.

学会発表

1. 鎌倉 良成, 水野 弘之, 谷口 研二, 浜口 智尋, “部分波の方法による不純物散乱確率の計算,” 第 39 回応用物理学関係連合講演会, 29a-ZL-9, 1992 年 3 月.
2. 鎌倉 良成, 山地 充, 水野 弘之, 竹中 正浩, 国清 辰也, 谷口 研二, 浜口 智尋, “バンド構造を考慮したモンテカルロシミュレーション,” 第 53 回応用物理学学会学術講演会, 17a-SE-16, 1992 年 9 月.
3. 鎌倉 良成, 水野 弘之, 国清 辰也, 竹中 正浩, 森藤 正人, 谷口 研二, 浜口 智尋, “誘電関数の周波数依存性がインパクトイオン化率に与える影響,” 第 40 回応用物理学関係連合講演会, 30a-ZV-8, 1993 年 3 月.
4. 竹中 正浩, 山地 充, 鎌倉 良成, 水野 弘之, 国清 辰也, 谷口 研二, 浜口 智尋, “バンド構造を考慮したモンテカルロシミュレーション—フォノン散乱とインパクトイオン化の波数依存性について,” 第 40 回応用物理学関係連合講演会, 29p-E-8, 1993 年 3 月.
5. 山地 充, 鎌倉 良成, 国清 辰也, 谷口 研二, 浜口 智尋, “多数バレーを用いた Si 中の電子輸送のモンテカルロシミュレーション (1),” 第 54 回応用物理学学会学術講演会, 28p-ZT-12, 1993 年 9 月.
6. 鎌倉 良成, 山地 充, 国清 辰也, 谷口 研二, 浜口 智尋, “多数バレーを用いた Si 中の電子輸送のモンテカルロシミュレーション (2),” 第 54 回応用物理学学会学術講演会, 28p-ZT-13, 1993 年 9 月.
7. 山地 充, 鎌倉 良成, 山口 清一郎, 谷口 研二, 浜口 智尋, “簡易型バンドモンテカルロシミュレータによるキャリア輸送解析,” 第 41 回応用物理学関係連合講演会, 28a-ZM-6, 1994 年 3 月.
8. 園田 賢一郎, 山地 充, 鎌倉 良成, 谷口 研二, 浜口 智尋, “ハイドロダイナミックモデルのための物理モデルの検討,” 第 41 回応用物理学関係連合講演会, 29a-ZM-6, 1994 年 3 月.
9. 鎌倉 良成, 飯塚 貴弘, 山本 佳史, 田中 克彦, 松本 比呂志, “高速なフルバンドモンテカルロシミュレータの開発,” 第 43 回応用物理学関係連合講演会, 27a-G-3, 1996 年 3 月.
10. 谷口 研二, 宇都宮 裕人, 富田 孝之, 梅田 一徳, 鎌倉 良成, “薄いゲート酸化膜の擬似破壊モードについて,” 第 58 回応用物理学学会学術講演会講演会, 3p-R-7, 1997 年 10 月.
11. 斎藤 朋也, 夏 建新, 青木 丈典, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “ボロンの過渡増速拡散とクラスタ形成の深さ依存性,” 第 58 回応用物理学学会学術講演会講演会, 3a-PC-1, 1997 年 10 月.
12. 夏 建新, 斎藤 朋也, 青木 丈典, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “イオン注入損傷によるボロンの析出,”

- 第 58 回応用物理学会学術講演会講演会, 3a-PC-2, 1997 年 10 月.
13. 鎌倉 良成, 宇都宮 裕人, 桜 俊幸, 谷口 研二, “酸化膜絶縁破壊と注入キャリアエネルギーの関係,” 第 58 回応用物理学会学術講演会講演会, 3p-K-10, 1997 年 10 月.
 14. 宇都宮 裕人, 桜 俊幸, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “定電流ストレスによる極薄酸化膜の絶縁破壊,” 第 58 回応用物理学会学術講演会講演会, 3p-K-11, 1997 年 10 月.
 15. 桜 俊幸, 宇都宮 裕人, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “定電流ストレスによる極薄酸化膜の擬似破壊 (I),” 第 45 回応用物理学関係連合講演会, 28p-M-1, 1998 年 3 月.
 16. 宇都宮 裕人, 桜 俊幸, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “定電流ストレスによる極薄酸化膜の擬似破壊 (II),” 第 45 回応用物理学関係連合講演会, 28p-M-2, 1998 年 3 月.
 17. 鎌倉 良成, 宇都宮 裕人, 桜 俊幸, 谷口 研二, “薄い酸化膜中の電子エネルギー緩和,” 第 45 回応用物理学関係連合講演会, 28p-L-4, 1998 年 3 月.
 18. 斎藤 朋也, 夏 建新, 青木 丈典, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “イオン注入直後の格子間 Si 原子分布に関する考察,” 第 45 回応用物理学関係連合講演会, 29p-K-2, 1998 年 3 月.
 19. 夏 建新, 斎藤 朋也, 青木 丈典, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “{311} 欠陥へのボロンの析出,” 第 45 回応用物理学関係連合講演会, 29p-K-3, 1998 年 3 月.
 20. 青木 丈典, 斎藤 朋也, 夏 建新, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “注入リン原子の過渡増速拡散のドーピング量依存性,” 第 45 回応用物理学関係連合講演会, 29p-K-6, 1998 年 3 月.
 21. 鎌倉 良成, 桜 俊幸, 谷口 研二, “酸化膜擬似破壊後の電気伝導特性,” 第 59 回応用物理学会学術講演会, 16p-ZG-2, 1998 年 9 月.
 22. 金 良守, 夏 建新, 斎藤 朋也, 青木 丈典, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “As イオン注入により生じた欠陥がドーパント拡散に与える影響,” 第 59 回応用物理学会学術講演会, 18a-ZL-5, 1998 年 9 月.
 23. 夏 建新, 斎藤 朋也, 金 良守, 青木 丈典, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “{311} 欠陥の成長/消滅によって誘起されたボロン原子の拡散モデル,” 第 59 回応用物理学会学術講演会, 18a-ZL-6, 1998 年 9 月.
 24. 桜 俊幸, 石田 明寛, 岡田 健治, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “擬似絶縁破壊後の電流特性の温度特性,” 第 46 回応用物理学関係連合講演会, 28a-ZS-10, 1999 年 3 月.
 25. 石田 明寛, 岡田 健治, 桜 俊幸, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “基板ホットエレクトロン注入による薄いゲート酸化膜の絶縁破壊特性,” 第 46 回応用物理学関係連合講演会, 28a-ZS-11, 1999 年 3 月.
 26. 鎌倉 良成, 谷口 研二, “シリコン結晶中の高エネルギー正孔散乱確率の検証,” 第 46 回応用物理学関係連合講演会, 28p-G-3, 1999 年 3 月.
 27. 小林 弘幸, 夏 建新, 斎藤 朋也, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “第一原理計算によるシリコン結晶内の {311} 欠陥へのボロン析出の解析,” 第 46 回応用物理学関係連合講演会, 30a-ZP-6, 1999 年 3 月.
 28. 夏 建新, 斎藤 朋也, 金 良守, 青木 丈典, 古田 善一, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “注入ボロン原子拡散における Rp 欠陥へのボロン析出の影響,” 第 46 回応用物理学関係連合講演会, 30a-ZP-7, 1999 年 3 月.
 29. 古田 善一, 夏 建新, 金 良守, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “低エネルギー注入ボロン原子分布のキンク濃度と熱処理温度との関係,” 第 46 回応用物理学関係連合講演会, 30a-ZP-8, 1999 年 3 月.
 30. 金 良守, 夏 建新, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “Ga, Ge, As 注入後の a/c 界面への B の析出,” 第 46 回応用物理学関係連合講演会, 30a-ZP-9, 1999 年 3 月.
 31. 青木 丈典, 金 良守, 夏 建新, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “過渡増速拡散時の注入リン原子のシリコ

- ン表面への析出,” 第 46 回応用物理学関係連合講演会, 30p-ZP-6, 1999 年 3 月.
32. 金 良守, 夏 建新, 斎藤 朋也, 青木 丈典, 小林 弘幸, 古田 善一, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “As イオン注入に起因する Si 結晶中での As 過渡増速拡散と B 再分布,” 電気化学会 第 56 回半導体・集積回路技術シンポジウム, pp. 65-70, 1999 年 6 月.
 33. 小林 弘幸, 斎藤 朋也, 金 良守, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “炭素原子による格子間シリコン原子拡散抑制の第一原理計算による解析,” 第 60 回応用物理学学会学術講演会, 2a-ZR-7, 1999 年 9 月.
 34. 青木 丈典, 斎藤 朋也, 金 良守, 古田 善一, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “過渡増速拡散における EOR 欠陥の影響,” 第 60 回応用物理学学会学術講演会, 2p-ZR-1, 1999 年 9 月.
 35. 金 良守, 夏 建新, 斎藤 朋也, 青木 丈典, 古田 善一, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “Si イオン注入ダメージによる As の過渡増速拡散,” 第 60 回応用物理学学会学術講演会, 2p-ZR-4, 1999 年 9 月.
 36. 岡田 健治, 桜 俊幸, 石田 明寛, 宇野 重康, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “ゲート絶縁膜における完全絶縁破壊後電流の伝導機構,” 第 60 回応用物理学学会学術講演会, 2p-ZT-1, 1999 年 9 月.
 37. 石田 明寛, 岡田 健治, 桜 俊幸, 宇野 重康, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “絶縁破壊寿命のキャリア注入方法依存性の起源,” 第 60 回応用物理学学会学術講演会, 2p-ZT-2, 1999 年 9 月.
 38. 宇野 重康, 石田 明寛, 岡田 健治, 出口 和亮, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “酸化膜絶縁破壊時における膜中での電子トラップの密度分布,” 第 60 回応用物理学学会学術講演会, 2p-ZT-3, 1999 年 9 月.
 39. 鎌倉 良成, 谷口 研二, “イオン化率の異方性を考慮した電荷分離実験のシミュレーション,” 第 60 回応用物理学学会学術講演会, 4a-ZL-4, 1999 年 9 月.
 40. 谷口 研二, 鎌倉 良成, 岡田 健治, 宇野 重康, 石田 明寛, “薄膜ゲート絶縁膜の課題と展望,” 第 47 回応用物理学関係連合講演会, 28a-YA-3, 2000 年 3 月.
 41. 青木 丈典, 斎藤 朋也, 夏 建新, 金 良守, 古田 善一, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “シリコン酸化膜界面への格子間シリコン原子の析出を考慮したリン原子のシミュレーション,” 第 47 回応用物理学関係連合講演会, 28a-YE-10, 2000 年 3 月.
 42. 小林 弘幸, 金 良守, 斎藤 朋也, 古田 善一, 廣瀬 哲也, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “炭素クラスタを含むボロンの増速拡散シミュレーション,” 第 47 回応用物理学関係連合講演会, 28a-YE-11, 2000 年 3 月.
 43. 出口 和亮, 石田 明寛, 宇野 重康, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “基板ホットホール注入による極薄酸化膜の劣化特性,” 第 47 回応用物理学関係連合講演会, 28p-YA-2, 2000 年 3 月.
 44. 川島 一郎, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “分子動力学モンテカルロ法による反転層移動度の酸化膜厚依存性の解析,” 第 47 回応用物理学関係連合講演会, 28p-YA-9, 2000 年 3 月.
 45. 石田 明寛, 宇野 重康, 出口 和亮, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “ゲート絶縁膜破壊直前に見られるリーク電流の伝導特性,” 第 47 回応用物理学関係連合講演会, 29p-P9-2, 2000 年 3 月.
 46. 宇野 重康, 石田 明寛, 出口 和亮, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “酸化膜疑似破壊時のリーク電流メカニズム,” 第 47 回応用物理学関係連合講演会, 29p-P9-3, 2000 年 3 月.
 47. 車野 敏文, 金 良守, 青木 丈典, 小林 弘幸, 古田 善一, 林 俊介, 廣瀬 哲也, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “Si 基板中における F の拡散,” 第 47 回応用物理学関係連合講演会, 30a-YK-1, 2000 年 3 月.
 48. 林 俊介, 金 良守, 青木 丈典, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “In 注入後の In の過渡増速拡散とそのドーピング量依存性,” 第 47 回応用物理学関係連合講演会, 30a-YK-2, 2000 年 3 月.
 49. 金 良守, 青木 丈典, 小林 弘幸, 古田 善一, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “低エネルギー As 注入後の As 過渡増速拡散と B 析出,” 第 47 回応用物理学関係連合講演会, 30a-YK-5, 2000 年 3 月.
 50. 廣瀬 哲也, 金 良守, 青木 丈典, 小林 弘幸, 古田 善一, 林 俊介, 車野 敏文, 鎌倉 良成, 谷口 研二,

- “ボロンの過渡増速拡散の炭素濃度依存性,” 第 47 回応用物理学関係連合講演会, 30a-YK-6, 2000 年 3 月.
51. 古田 善一, 金 良守, 青木 丈典, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “注入ボロン原子の Si 表面への偏析に関する考察,” 第 47 回応用物理学関係連合講演会, 30a-YK-7, 2000 年 3 月.
52. 川島 一郎, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “分子動力学モンテカルロ法の並列処理を用いた微細 MOSFET の解析,” 第 61 回応用物理学学会学術講演会, 3a-ZE-5, 2000 年 9 月.
53. 石田 明寛, 宇野 重康, 出口 和亮, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “極薄酸化膜におけるダイレクトトンネル電流のモデリング,” 第 61 回応用物理学学会学術講演会, 4a-ZD-5, 2000 年 9 月.
54. 宇野 重康, 石田 明寛, 出口 和亮, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “酸化膜擬似絶縁破壊後リーク電流モンテカルロシミュレーション,” 第 61 回応用物理学学会学術講演会, 4a-ZD-7, 2000 年 9 月.
55. 車野 敏文, 金 良守, 古田 善一, 林 俊介, 廣瀬 哲也, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “B の拡散における F イオンの影響,” 第 61 回応用物理学学会学術講演会, 6a-ZD-2, 2000 年 9 月.
56. 林 俊介, 金 良守, 車野 敏文, 廣瀬 哲也, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “高ドーズ In 注入時における過渡増速拡散,” 第 61 回応用物理学学会学術講演会, 6a-ZD-3, 2000 年 9 月.
57. 鎌倉 良成, 出口 和亮, 石田 明寛, 宇野 重康, 谷口 研二, “極薄ゲート酸化膜の経時絶縁破壊,” 平成 12 年電気学会 電子・情報・システム部門大会, TC2-5, 2000 年 9 月.
58. 林 俊介, 金 良守, 車野 敏文, 廣瀬 哲也, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “高ドーズ In 注入時の異常拡散メカニズム,” 第 48 回応用物理学関係連合講演会, 28a-P2-1, 2001 年 3 月.
59. 廣瀬 哲也, 車野 敏文, 金 良守, 古田 善一, 林 俊介, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “第一原理計算によるシリコン基板中のフッ素に関する研究,” 第 48 回応用物理学関係連合講演会, 30a-C-1, 2001 年 3 月.
60. 辻 博史, 久保 等, 金 良守, 林 俊介, 車野 敏文, 廣瀬 哲也, 鎌倉 良成, 濱口 智尋, 谷口 研二, “{311} 欠陥の PL 発光効率のサイズ依存性,” 第 48 回応用物理学関係連合講演会, 30p-C-15, 2001 年 3 月.
61. 鎌倉 良成, 川島 一郎, 谷口 研二, “分子動力学/アンサンブルモンテカルロ法によるリモートイオン散乱効果の解析,” 第 48 回応用物理学関係連合講演会, 29a-ZS-8, 2001 年 3 月.
62. 宇野 重康, 石田 明寛, 出口 和亮, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “SILC における量子生成効率のストレス依存性,” 第 48 回応用物理学関係連合講演会, 29p-YF-3, 2001 年 3 月.
63. 出口 和亮, 石田 明寛, 宇野 重康, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “ホール注入による極薄ゲート酸化膜の絶縁性劣化に対する物理モデル,” 第 48 回応用物理学関係連合講演会, 29p-YF-4, 2001 年 3 月.
64. 岩田 亮, 宇野 重康, 石田 明寛, 出口 和亮, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “ゲート酸化膜における Pre-Breakdown 発生の統計性,” 第 48 回応用物理学関係連合講演会, 29p-YF-11, 2001 年 3 月.
65. 酒井 敦, 石田 明寛, 宇野 重康, 森藤 正人, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “強結合近似法による SiO_2 の複素バンド構造の計算,” 第 48 回応用物理学関係連合講演会, 29p-YF-15, 2001 年 3 月.
66. 出口 和亮, 宇野 重康, 細井 卓治, 森川 周一, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “チャネルホットホール注入による極薄酸化膜の劣化特性,” 第 62 回応用物理学学会学術講演会, 12a-C-2, 2001 年 9 月.
67. 細井 卓治, 出口 和亮, 宇野 重康, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “極薄ゲート酸化膜における絶縁破壊現象の過渡特性,” 第 62 回応用物理学学会学術講演会, 12a-C-4, 2001 年 9 月.
68. 領家 弘典, 中辻 広志, 酒井 敦, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “MD/EMC 法による反転層電子移動度のロールオフ現象の解析,” 第 49 回応用物理学関係連合講演会, 27a-P3-15, 2002 年 3 月.
69. 細井 卓治, 出口 和亮, 宇野 重康, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “極薄ゲート酸化膜における Hard 及び Soft Breakdown によるリークパス成長,” 第 49 回応用物理学関係連合講演会, 27p-A-10,

2002 年 3 月.

70. 鎌倉 良成, 谷口 研二, “低バイアスを印加した MOS ダイオード内部のキャリアエネルギー分布,” 第 49 回応用物理学関係連合講演会, 27p-A-12, 2002 年 3 月.
71. 森川 周一, 出口 和亮, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “チャネルホットキャリアのダイレクトトンネリングに起因した酸化膜の劣化特性,” 第 49 回応用物理学関係連合講演会, 27p-A-13, 2002 年 3 月.
72. 中辻 広志, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “歪みシリコン MOSFET における二次元ホールガスの解析,” 第 49 回応用物理学関係連合講演会, 28p-ZC-11, 2002 年 3 月.
73. 久保田 圭, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “厚い酸化膜の絶縁破壊統計性に対するパーコレーションモデルの適用可能性,” 第 63 回応用物理学学会学術講演会, 24p-C-12, 2002 年 9 月.
74. 中辻 広志, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “フルバンドモンテカルロ法によるひずみ Si-pMOSFET の反転層ホール輸送解析,” 第 50 回応用物理学関係連合講演会, 27a-ZS-9, 2003 年 3 月.
75. 久保田 圭, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “厚い酸化膜における絶縁破壊統計のストレス条件依存性,” 第 50 回応用物理学関係連合講演会, 28a-ZW-6, 2003 年 3 月.
76. 中辻 広志, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “ひずみ Si-pMOSFET における反転層移動度増大メカニズムの理論的検討,” 第 50 回応用物理学関係連合講演会, 28p-ZV-7, 2003 年 3 月.
77. 谷藤 亮, 酒井 敦, 広瀬 哲也, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “強結合近似法による β -Si₃N₄ の複素バンド構造の計算,” 第 50 回応用物理学関係連合講演会, 30p-ZE-7, 2003 年 3 月.
78. 領家 弘典, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “分子動力学/アンサンブルモンテカルロ法による速度飽和の電子濃度依存性解析,” 第 64 回応用物理学学会学術講演会, 30a-N-6, 2003 年 8 月.
79. 酒井 敦, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “セルオートマトン法による電子波伝播解析 —境界条件の設定—,” 第 64 回応用物理学学会学術講演会, 30a-N-10, 2003 年 8 月.
80. 細井 卓治, 森川 周一, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “極薄ゲート酸化膜における擬似絶縁破壊後のリーク電流の飽和機構,” 第 64 回応用物理学学会学術講演会, 31a-P3-9, 2003 年 8 月.
81. 森川 周一, 細井 卓治, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “極薄ゲート酸化膜の擬似絶縁破壊後による回路動作への影響,” 第 64 回応用物理学学会学術講演会, 31a-P3-10, 2003 年 8 月.
82. 谷藤 亮, 酒井 敦, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “強結合近似法による酸化膜の複素バンド構造計算,” 第 64 回応用物理学学会学術講演会, 31a-P3-21, 2003 年 8 月.

研究会

1. 国清 辰也, 鎌倉 良成, 山地 充, 水野 弘之, 竹中 正浩, 谷口 研二, 浜口 智尋, “バンド構造を考慮したモンテカルロシミュレーション,” 電子情報通信学会エレクトロニクスソサイエティ研究会 (1992 年 9 月 30 日) 神奈川.
2. 宇都宮 裕人, 桜 俊幸, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “FN 注入ストレスによる極薄酸化膜の擬似破壊,” 極薄・表面物理分科会主催特別研究会 極薄シリコン酸化膜の形成・評価・信頼性 (1998 年 1 月 23-24 日) 静岡.
3. 鎌倉 良成, 宇都宮 裕人, 桜 俊幸, 谷口 研二, “ホットキャリアによる極薄ゲート酸化膜絶縁破壊機構の解析,” 極薄・表面物理分科会主催特別研究会 極薄シリコン酸化膜の形成・評価・信頼性 (1998 年 1 月 23-24 日) 静岡.
4. 金 良守, 夏 建新, 斎藤 朋也, 青木 文典, 古田 善一, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “As イオン注入後の B の再分布メカニズム,” 応用物理学学会シリコンテクノロジー分科会第 4 回研究集会 (1998 年

- 10月30日) 東京.
5. 鎌倉 良成, 桜 俊幸, 石田 明寛, 谷口 研二, “小面積 MOS 構造に観測される酸化膜擬似破壊の特性”, 極薄・表面物理分科会主催特別研究会 極薄シリコン酸化膜の形成・評価・信頼性 (1999 年 1 月 22-23 日) 静岡.
 6. 鎌倉 良成, 石田 明寛, 宇野 重康, 桜 俊幸, 谷口 研二, “酸化膜擬似破壊後の電気伝導特性”, 極薄・表面物理分科会/シリコンテクノロジー分科会共催特別研究会 極薄シリコン酸化膜の形成・評価・信頼性 (1999 年 1 月 22-23 日) 静岡.
 7. 小林 弘幸, 金 良守, 夏 建新, 斎藤 朋也, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “Si イオン注入ダメージによる As の過渡増速拡散,” 電子情報通信学会エレクトロニクスソサイエティ研究会, VLD99-51 (1999 年 8 月 26 日-27 日) 東京.
 8. 金 良守, 夏 建新, 斎藤 朋也, 青木 丈典, 小林 弘幸, 古田 善一, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “Si イオン注入ダメージによる As の過渡増速拡散,” 電子情報通信学会エレクトロニクスソサイエティ研究会, VLD99-62 (1999 年 8 月 26 日-27 日) 東京.
 9. 出口 和亮, 宇野 重康, 石田 明寛, 廣瀬 哲也, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “ホールのダイレクトトンネリングに起因する極薄酸化膜の劣化特性”, 応用物理学会シリコンテクノロジー分科会第 25 回研究集会 (2001 年 1 月 24 日) 東京.
 10. 出口 和亮, 宇野 重康, 石田 明寛, 廣瀬 哲也, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “ホールのダイレクトトンネリングによる極薄酸化膜の劣化特性”, 極薄・表面物理分科会/シリコンテクノロジー分科会共催特別研究会 極薄シリコン酸化膜の形成・評価・信頼性 (2001 年 1 月 26-27 日) 静岡.
 11. 中辻 広志, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “歪み Si のバンド構造の経験的擬ポテンシャル法による解析”, 応用物理学会シリコンテクノロジー分科会 第 32 回分科会 (2001 年 9 月 27-28 日) 東京.
 12. 酒井 敦, 鎌倉 良成, 森藤 正人, 谷口 研二, “極薄酸化膜の直接トンネリング電流計算における複素バンド構造モデルの重要性”, 応用物理学会シリコンテクノロジー分科会 第 32 回分科会 (2001 年 9 月 27-28 日) 東京.
 13. 鎌倉 良成, 川島 一郎, 谷口 研二, “分子動力学/アンサンブルモンテカルロ法によるリモートイオン化不純物散乱の解析”, 応用物理学会シリコンテクノロジー分科会 第 33 回分科会 (2001 年 11 月 9 日) 神戸.
 14. 領家 弘典, 鎌倉 良成, 谷口 研二: “MD/EMC 法による反転層移動度のロールオフ現象の解析”, 電子情報通信学会エレクトロニクスソサイエティ研究会, SDM2002-175 (2002 年 9 月 30 日-10 月 1 日) 東京.
 15. 酒井 敦, 鎌倉 良成, 谷口 研二: “量子格子気体法によるデバイス内部の電子波伝播解析”, 電子情報通信学会エレクトロニクスソサイエティ研究会, SDM2002-178 (2002 年 9 月 30 日-10 月 1 日) 東京.
 16. 鎌倉 良成, 細井 卓治, 森川 周一, 久保田 圭, 谷口 研二, “極薄ゲート酸化絶縁膜の経時絶縁性劣化,” 日本学術振興会 半導体界面制御技術第 154 委員会 第 38 回研究会 (2002 年 12 月 6 日) 名古屋.
 17. 森川 周一, 出口 和亮, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “直接トンネルゲート絶縁膜を有する pMOSFET のチャネルホットホール劣化”, 極薄・表面物理分科会/シリコンテクノロジー分科会共催特別研究会 極薄シリコン酸化膜の形成・評価・信頼性 (2003 年 1 月 24-25 日) 静岡.
 18. 細井 卓治, Pascal Lo Ré, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “極薄ゲート酸化膜における擬似絶縁破壊後のゲートリーク電流の時間変化”, 極薄・表面物理分科会/シリコンテクノロジー分科会共催特別研究会 極薄シリコン酸化膜の形成・評価・信頼性 (2003 年 1 月 24-25 日) 静岡.
 19. 細井 卓治, Pascal Lo Ré, 鎌倉 良成, 谷口 研二, “擬似絶縁破壊による消費電力増加の LSI 信

頼性への懸念”, 応用物理学会シリコンテクノロジー分科会第 48 回研究集会 (2003 年 2 月 6 日) 東京.

20. 森川 周一, 細井 卓治, 鎌倉 良成, 谷口 研二: ”極薄ゲート酸化膜の擬似絶縁破壊が与える回路動作への影響”, 電子情報通信学会エレクトロニクスソサイエティ研究会, VLD2003-57 (2003 年 9 月 29 日) 東京.

解説

1. 富田 孝之, 宇都宮 裕人, 谷口 研二, 鎌倉 良成, “ゲート酸化膜の絶縁破壊メカニズム,” 日本信頼性学会誌「信頼性」 vol. 19, no. 4, pp. 22-31, 1997.
2. 鎌倉 良成, “デバイスシミュレーション・物理モデル,” 次世代 ULSI プロセス技術, 広瀬 全孝 編, pp. 706-721, REALIZE INC., 2000.