



Title	モンテカルロ法による半導体中の熱輸送シミュレーションに関する研究
Author(s)	久木田, 健太郎
Citation	大阪大学, 2014, 博士論文
Version Type	VoR
URL	<a href="https://doi.org/10.18910/34463">https://doi.org/10.18910/34463</a>
rights	
Note	

*The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA*

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

The University of Osaka

## 論文内容の要旨

氏名(久木田健太郎)	
論文題名	モンテカルロ法による半導体中の熱輸送シミュレーションに関する研究
論文内容の要旨	
<p>本論文はモンテカルロ法による半導体中の熱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、以下の5章で構成した。以下各章ごとの概要を述べる。</p> <p>1章では、研究背景、並びに熱輸送モンテカルロ(MC)法における課題と本研究の目的について述べた。</p> <p>2章では、熱輸送MC法の物理モデルやアルゴリズムに関する基本概念を解説すると共に、熱拡散係数特性解析に対し高効率化を実現する新規アルゴリズムの導入、並びに物理モデル高精度化を行った結果について述べた。従来のMC法ではシミュレーション系に有限温度差を与え、その結果発生する熱流を求めることで熱伝導率の解析を行っていたが、フォノン平均自由行程よりも十分に長い構造を想定しなければならないため計算負荷が大きいことが欠点であった。さらに、従来法には近似化したフォノン分散モデルが適用されていたため、輸送特性に対しパラメータ任意性が存在することが問題であった。本論文ではMC粒子に対する重み付与を工夫することで、1粒子法による熱拡散係数の算出を可能とし、従来法と比較して計算時間を大幅に軽減することができた。さらに現実的フォノン分散関係を適用してフォノン速度やエネルギー分布といった情報に対しての不確定性を取り除くことで、物理モデルの高精度化を図った。本シミュレータを用いて薄膜SiおよびSiナノワイヤにおける熱伝導率の解析を行ったところ、実験値を再現するためには拡散的な界面散乱を考慮する必要があることがわかった。</p> <p>3章では、2章で開発した熱輸送MCシミュレータを、単純Si構造中の温度分布解析へと応用し、微細構造中の熱輸送に関する基本特性を調べた結果について述べた。半導体デバイス内部の温度解析はこれまで熱伝導方程式や熱回路等、フーリエ則に基づくものが主流であったが、フォノンの平均自由行程よりも小さな構造中では、その法則適用の前提条件が破綻するため、精度が疑問視される。本論文では、Si棒の両端に温度一定の熱浴を設けその長さを様々に変化させることで、拡散から弾道へと変化する熱伝導機構の遷移過程を調べた。その結果、デバイス長がフォノン平均自由行程(室温では約100 nm)を下回ると熱伝導は弾道的特性を示し、フーリエ則が破綻することが明らかになった。また、弾道輸送領域においては熱輸送特性は構造サイズやフォノン平均自由行程に依存せずフォノン分散から与えられる情報によって決定されるため、分散モデルの精度が特に重要なことを示した。</p> <p>4章では、熱輸送MCシミュレータをナノスケールトランジスタの解析へと応用した結果について述べた。現実的なデバイス構造を考慮した温度解析には、現在でもフーリエ則に基づくシミュレータが広く用いられており、MCシミュレータの適用事例はこれまでほとんど報告されていなかった。今回開発した熱輸送MCシミュレータを用いれば、実際のデバイス構造中において、3章で述べたような弾道輸送効果がどの程度重要となるのかを把握することができる。本論文では、解析対象としてバルクFin Field-Effect Transistor (FinFET)を取り上げ、その定常状態での発熱特性を解析した。その結果、フーリエ則を用いた場合と比較して、MC法はより高温のホットスポット出現を予測する事が明らかになった。要因を分析したところ、熱経路の断面積が急激に拡張するような領域において特に弾道輸送の影響が顕在化し、フーリエ則が熱抵抗を過小評価することを示した。</p> <p>5章では、本論文で取り上げる各研究の成果についてまとめた。</p>	

## 論文審査の結果の要旨及び担当者

氏名(久木田健太郎)		
論文審査担当者	(職)	氏名
	主査	准教授 鎌倉 良成
	副査	教授 伊藤 利道
	副査	教授 森田 瑞穂
	副査	准教授 森 伸也
	副査	教授 小田中 紳二(サイバーメディアセンター)
	副査	教授 森 勇介
	副査	教授 片山 光浩
	副査	教授 尾崎 雅則
	副査	教授 栖原 敏明
	副査	教授 近藤 正彦
	副査	教授 大森 裕
	副査	教授 八木 哲也

## 論文審査の結果の要旨

本論文はモンテカルロ(MC)法による半導体中の熱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、以下の5章で構成されている。

第1章では、研究背景、並びに熱輸送MC法における課題と本研究の目的について述べている。

第2章では、熱輸送MC法の物理モデルやアルゴリズムに関する基本概念を解説すると共に、熱拡散係数特性解析に対し高効率化を実現する新規アルゴリズムの導入、並びに物理モデル高精度化を行った結果について述べている。従来のMC法では長い棒形の構造を用い、有限温度差中の熱流を求めることで熱伝導率の解析を行っていたが、フォノン平均自由行程よりも十分に長い構造を想定しなければならないため計算負荷が大きいことが欠点とされている。さらに、従来法には近似化したフォノン分散モデルが適用されていたため、輸送特性に対しパラメータ任意性が存在する問題も指摘されている。本論文ではMC粒子に対する重み付与を工夫することで、1粒子法による熱拡散係数の算出を可能とし、従来法と比較して計算時間を大幅に軽減できることを示している。さらに現実的フォノン分散関係を適用してフォノン速度やエネルギー分布といった情報に対しての不確定性を取り除くことで、物理モデルの高精度化を行っている。また、本シミュレータを用いて薄膜SiおよびSiナノワイヤにおける熱伝導率の解析を行い、実験値を再現するためには拡散的な界面散乱を考慮する必要性があることを明らかにしている。

第3章では、第2章で開発した熱輸送MCシミュレータを、単純Si構造中の温度分布解析へと応用し、微細構造中の熱輸送に関する基本特性を調べた結果について述べている。半導体デバイス内部の温度解析はこれまで熱伝導方程式や熱回路等、フーリエ則に基づくものが主流であったが、フォノンの平均自由行程よりも小さな構造中では、その法則適用の前提条件が破綻するため、精度が疑問視されている。本論文では、Si棒の両端に温度一定の熱浴を設けその長さを様々に変化させることで、拡散から弾道へと変化する熱伝導機構の遷移過程を調べている。その結果、デバイス長がフォノン平均自由行程(室温では約100nm)を下回ると熱伝導は弾道的特性を示し、フーリエ則が破綻することを明らかにしている。また、弾道輸送領域においては、熱輸送特性は構造サイズやフォノン平均自由行程に依存せずフォノン分散から与えられる情報によって決定されるため、分散モデルの精度が特に重要なことを指摘している。

第4章では、熱輸送MCシミュレータをナノスケールトランジスタの解析へと応用した結果について述べている。現実的なデバイス構造を考慮した温度解析には、現在でもフーリエ則に基づくシミュレータが広く用いられており、MCシミュレータの適用事例は、これまでほとんど報告されていない。そこで本論文では、開発した熱輸送MCシミュレータを用いることで、実際のデバイス構造中において、第3章で述べたような弾道輸送効果がどの程度重要となるのかを調べている。解析対象としてバルクFin Field-Effect Transistor(FinFET)を取り上げ、その直流通電時の発熱特性を解析した結果、フーリエ則を用いた場合と比較して、MC法はより高温のホットスポット出現を予測することを明らかにしている。さらに詳細な要因分析を行うことで、熱経路の断面積が急激に拡張するような領域において特に弾道輸送の影響が顕在化しフーリエ則による熱抵抗の過小評価が起こることを示している。

第5章では、本論文を通して得られた結果をまとめ、結論を述べている。

以上のように、本論文ではナノスケールデバイスで顕在化する準弾道フォノン輸送を高精度に解析するための新規シミュレータの開発過程で提唱した物理モデルやアルゴリズムについて詳述するとともに、その有用性を明らかにしている。さらに、そのシミュレータを応用して最先端の極微細トランジスタ中の熱伝導を解析し、準弾道フォノン輸送効果が素子温度上昇の予測精度に与える影響を定量的に示した上で、さらに一般的に用いられてきた従来解析手法の精度上の問題点を明確化し、その機構についても緻密な議論を展開している。これらの新たな知見は、微細デバイスにおける熱伝導の素過程の正確な理解や自己発熱効果による素子温度上昇の高精度な予測に結びつき、今後ますます重要となる電子デバイスの計算機支援熱耐性設計技術の発展に大きく資するものである。

よって本論文は博士論文として価値あるものと認める。