



Title	A Study of a Quantum Energy-Transport Model for Semiconductors
Author(s)	鍾, 菁廣
Citation	大阪大学, 2014, 博士論文
Version Type	VoR
URL	<a href="https://doi.org/10.18910/34554">https://doi.org/10.18910/34554</a>
rights	
Note	

*Osaka University Knowledge Archive : OUKA*

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

Osaka University

## 論文内容の要旨

氏名（鍾 薈廣）	
論文題名	A Study of a Quantum Energy-Transport Model for Semiconductors (半導体における量子エネルギー輸送モデルの研究)
<b>論文内容の要旨</b>	

電子輸送シミュレーションのために、Wigner-Boltzmann方程式のモーメント展開により量子流体モデルが導出され、その拡散スケーリングによって量子エネルギー輸送(QET)モデル、量子ドリフト拡散(QDD)モデルが導出される。本論文では、量子閉じ込め効果、トンネル効果と共にホットキャリア効果もシミュレーション出来る定常な量子エネルギー輸送モデルについて、数理モデルの導出、数値スキーム及び反復解法の構成、新材料・新構造を持つ次世代半導体デバイスにおける数値シミュレーション結果について議論している。

古典モデルでは、Boltzmann方程式の3つのモーメントからフーリエ則近似を用いて流体モデルが導出されてきた。さらに流体モデルの拡散スケーリングによってエネルギー輸送(ET)モデルが導出される。しかしながらフーリエ則近似の問題点が指摘されており、この問題を解決するために4モーメントETモデルが導出されている。フーリエ則近似による問題点は量子モデルにおいても残っており、従来のQETモデルはいずれもフーリエ則近似を用いた3モーメントQETモデルとなっている。本論文では、モーメント展開におけるClosureの問題に着目し、新たに4モーメントQETモデルを構築した。4モーメントQETモデルではフーリエ則近似を用いることなくQETモデルが導出されるため、現実的問題に即したモデルとなっている。数値スキームの構成においては、電流と総エネルギー流の保存という観点から、1次モーメントである電流密度と3次モーメントであるエネルギー流密度が、同一の自己共役形式に書けることに着目し、古典モデルと同様にSharfetter-Gummel型スキームを構成した。反復解法の構成では、新たに正値性を保った減速型反復法を開発し、数値安定性が向上している。次世代半導体デバイスの数値シミュレーションでは、高移動度材料を基板にもつBulk及びマルチゲートMOSFETの特性評価を行い、電子輸送特性が各材料によって異なることを示した。

本論文は全6章で構成され、その内容は以下の通りである。第1章では、Wigner-Boltzmann方程式から導出される量子流体モデルの階層構造について述べている。第2章では、Wigner-Boltzmann方程式の4つのモーメントから構成される方程式の拡散スケーリングによって4モーメントQETモデルを導出している。ストレステンソルとエネルギー密度の量子補正項は、エネルギー流密度のドリフトに寄与する項にのみ含め、拡散に寄与する項では無視してモデルを導出した。第3章では、4モーメントQETモデルの空間の離散化について述べている。空間の離散化は新たな変数の組で行った。電流連続式とエネルギー保存式において、古典モデルと同一の高精度非線形スキームを構成している。第4章では、4モーメントQETモデルの反復解法について述べている。正値性を保った減速型反復法を開発している。数値計算法の収束解析は数値実験結果によって示している。第5章では、4モーメントQETモデルを用いて、新材料、新構造を持つ半導体デバイスの輸送特性評価について述べている。シリコン、ゲルマニウム、インジウムガリウムヒ素を基板にもつBulk及びマルチゲートMOSFETの特性評価を行った。第6章では、本研究の成果を要約している。

## 論文審査の結果の要旨及び担当者

氏名(鍾青廣)		
論文審査担当者	(職)	氏名
	主査 教授	小田中 紳二
	副査 教授	松村 昭孝
	副査 准教授	降旗 大介
	副査 准教授	茶碗谷 毅

## 論文審査の結果の要旨

極微半導体構造における電子輸送シミュレーションのために、電子輸送の量子性やホットキャリア効果のモデル化が必要である。近年、Wigner-Boltzmann方程式のモーメント展開により量子流体方程式を導出して、量子流体モデルを構築する研究が進められている。量子流体方程式は階層モデル構造を有しており、各階層の物理モデルの構築が必要である。また、その数値シミュレーションを実現していくには、今までの計算理論を応用するだけではなく、数学的側面と物理学的側面から新たな計算理論を構築して、数値スキームや反復解法などの計算モデルを構成することが必要となっている。そのモデル階層の中で、量子エネルギー輸送(QET)モデルは電子輸送の量子性やホットキャリア効果のモデル化が可能であると考えられてきたが、その研究は未だ不十分であった。今までの研究では、モーメント展開のClosureとしてフーリエ則を用いた3モーメントモデルが導出され、簡略化されたQETモデルにおいてその数値計算手法が議論されている。

本論文では、量子流体モデルの拡散スケーリングによるモデル方程式の導出において、モーメント展開におけるClosureの問題に着目し、4モーメント量子エネルギー輸送(QET)モデルの構築に成功している。従来、3モーメントQETモデルの提案はあったが、この研究は高次モーメント量子流体モデル研究の端緒をなすものである。また、質量保存式とエネルギー保存式に対して同一の高精度非線形保存スキームが適用できることを見出し、定常な量子エネルギー輸送方程式の離散化を達成している。さらに、非線形性の強い連立偏微分方程式系の安定な数値計算手法を得るために、正直性を保った減速型反復法を新たに開発している。これによって、QETモデルによる次世代半導体素子(ゲルマニウムやIII-V族半導体など高移動度材料をチャネルに有するマルチゲートMOSFET)の数値シミュレーションが実現されており、その性能予測や特性評価が示されている。以上のように、本論文の成果は独創的であり、理論的にも実用的にも価値のあるものといえる。

よって、博士(情報科学)の学位論文として価値のあるものと認める。