



Title	フルバンドモンテカルロ法によるシリコン中の電子輸送に関する研究
Author(s)	國清, 辰也
Citation	大阪大学, 2004, 博士論文
Version Type	
URL	<a href="https://hdl.handle.net/11094/44661">https://hdl.handle.net/11094/44661</a>
rights	
Note	著者からインターネット公開の許諾が得られていないため、論文の要旨のみを公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、<a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed">大阪大学の博士論文について</a>をご参照ください。

*The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA*

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

The University of Osaka

氏 名	くに きよ たつ や 國 清 辰 也
博士の専攻分野の名称	博 士 (工 学)
学 位 記 番 号	第 1 8 2 3 1 号
学 位 授 与 年 月 日	平成 16 年 1 月 23 日
学 位 授 与 の 要 件	学位規則第 4 条第 2 項該当
学 位 論 文 名	フルバンドモンテカルロ法によるシリコン中の電子輸送に関する研究
論 文 審 査 委 員	(主査) 教 授 谷 口 研 二  (副査) 教 授 森 田 瑞 穂    情報科学研究科教授 小田中紳二 助教授 森    伸也

### 論 文 内 容 の 要 旨

本論文は、フルバンドモンテカルロ法によるシリコン中の電子輸送に関する研究の成果をまとめたものであり、本文は6章で構成されている。

第1章では、本研究の背景と目的について概略を述べている。

第2章では、フルバンドモンテカルロ法において、電子のエネルギーやフォノン散乱確率やインパクトイオン化率を導出する際に必要となる擬ポテンシャル法によるフルバンド構造の計算方法について述べている。また、113枚の平面波で展開した波動関数を用いて、第一ブリルアン領域中の対称性の高い点のエネルギーの実測値を再現する擬ポテンシャルの値を抽出している。平面波の数を増やすことで、Cohen と Bergstresser が約 20 枚の平面波を用いて提唱している擬ポテンシャルよりも精度の高い数値を実現している。また、スピン軌道相互作用のモデルについても概観している。

第3章では、Rigid-pseudo-ion モデルによる電子のフォノン散乱確率の導出法について説明している。電子の波動関数は、擬ポテンシャル法から求めた pseudo-wave function を用い、フォノンの分散関係と分極ベクトルは、Bond-charge モデルから求めている。Rigid-pseudo-ion モデルで導出したフォノンの分散関係とシリコンのエネルギーバンド構造をもとに、電子のフォノン散乱確率が状態密度のエネルギー依存性と相似することを示している。また、この相似性が電子のエネルギー分布にハンプを形成する原因であることを第5章で述べている。

第4章では、Fermi の黄金律を基礎としたインパクトイオン化率のモデル化を行っている。第2章で求めた擬ポテンシャルシリコンを使って実バンド構造を考慮したインパクトイオン化率を計算し、そのインパクトイオン化率は実測値と極めて良く一致することを示している。

第5章では、新たに開発したモンテカルロシミュレータについて説明をしている。従来のモンテカルロシミュレータでは、電子散乱の終状態を決定する上で、エネルギー保存と運動量保存を同時に満たす方法が確立されていなかった。新しく開発したシミュレータでは電子散乱の終状態を決定する際、エネルギー保存と運動量保存を同時に満たす独自の方法を提案している。同シミュレータによるドリフト速度、拡散係数、量子効率、インパクトイオン化係数は実測値と良い一致を示している。

最後に、第6章では、本論文で取り上げた各研究の成果をまとめている。

## 論文審査の結果の要旨

21 世紀のユビキタス社会の実現に向けて、シリコン半導体素子の構造設計を支援する TCAD (Technology Computer Aided Design) 技術に要求される技術課題は山積している。本論文では、この山積する課題の中でも重要なシリコン中の電子輸送のモデリングに着目し、電子-フォノン散乱頻度やインパクトイオン化頻度のモデリングとそれらを組み込んだフルバンドモンテカルロシミュレーション技術に関する研究をまとめている。

この研究の内容には、モデルの高精度化における独創性と、新しい知見が含まれている。その主要な成果は次の通りである。

- (1) 擬ポテンシャル法により、113 枚の平面波で展開した波動関数を用いて、シリコンの第一ブリルアン領域中の対称性の高い点のエネルギーの実測値を再現する擬ポテンシャル値を抽出し、平面波の数を増やすことで、Cohen と Bergstresser が約 20 枚の平面波を用いて得られたエネルギーバンドよりも高精度な電子帯構造が得られることを明らかにしている。
- (2) 遷移確率を与える Fermi の黄金律から、Rigid-pseudo-ion モデルを用いて、電子-フォノン散乱確率の理論式を導き、シリコンの実バンドを反映したフォノン散乱確率を求めている。その結果、実バンド構造を反映したフォノン散乱確率のエネルギー依存性が、状態密度のエネルギー依存性と類似していることで、それが印加電界下における電子のエネルギー分布にハンプが現れる原因であることを示している。
- (3) 遷移確率を与える Fermi の黄金律からインパクトイオン化率の理論式を導き、シリコンの実バンドを反映したインパクトイオン化率を求めている。こうして得られたインパクトイオン化率のエネルギー依存性の理論値は、実測値と極めてよい一致を示している。
- (4) 開発したフルバンドモンテカルロシミュレータの中で、電子散乱の終状態を決定する上で必須なエネルギー保存と運動量保存を同時に満たす独自の方法を提案している。上記(2)、(3)で述べた散乱確率を同シミュレータに組み込み、シリコン中の電子のドリフト速度、拡散係数、インパクトイオン化係数の電界強度依存性を計算している。その結果、計算値は実測値と極めてよく一致することを示している。
- (5) 開発したフルバンドモンテカルロシミュレータにより、電子の速度オーバーシュート時のインパクトイオン化の異方性を明らかにしている。インパクトイオン化の頻度は、 $\langle 100 \rangle$ 、 $\langle 011 \rangle$ 、 $\langle 111 \rangle$  の順に大きいことを示している。これは、実測と定性的に良い一致を示している。また、熱平衡状態下において、インパクトイオン化の異方性が無くなる理由は、電子が第一ブリルアン領域中に広がり、インパクトイオン化率が平均化されるためであることを明らかにしている。

以上のように、本論文は、シリコン中の電子輸送モデリングに付随する様々な問題点を解決する方法を提示しており、半導体素子設計技術に関わる多くの知見をもたらし、今後の集積回路の高速化・低消費電力化に向けた有益な情報を提供するもので、半導体工学・電子工学の発展に貢献するところが大きい。よって、本論文は博士論文として価値あるものと認める。