Osaka University Knowledge Archive

Title	原子論的手法に基づく量子輸送デバイスシミュレーション技術に関する研究
Author(s)	三成, 英樹
Citation	大阪大学, 2010, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/57497
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、大阪大学の博士論文についてをご参照ください。

Osaka University Knowledge Archive : OUKA

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

Osaka University

【135】

氏　　名	三（み）　成（なり）　英（ひで）　樹（き）
博士の専攻分野の名称	博　士（工　学）
学　位　記　番　号	第　２３８５３　号
学位授与年月日	平成22年３月23日
学位授与の要件	学位規則第４条第１項該当 工学研究科電気電子情報工学専攻
学　位　論　文　名	**原子論的手法に基づく量子輸送デバイスシミュレーション技術に関する研究**
論　文　審　査　委　員	（主査） 教　授　谷口　研二 （副査） 教　授　伊藤　利道　　教　授　小田中紳二　　准教授　森　　伸也 教　授　森　　勇介　　教　授　片山　光浩　　教　授　杉野　　隆 教　授　尾崎　雅則　　教　授　栖原　敏明　　教　授　森田　清三 教　授　八木　哲也

論　文　内　容　の　要　旨

本研究では，微細な新構造，新材料デバイス中の物理現象を取り扱うことが可能な手法として，非平衡グリーン関数法に半経験的な強結合近似法を組み合わせることにより，原子論的手法に基づく量子輸送シミュレーション技術を開発した．また，開発したシミュレーション技術を用いて，微細な新構造，新材料デバイスの性能の予測を行った．本論文は全５章から構成されており，以下に各章ごとの概要を記す．

第１章では，本研究の研究背景，研究目的について説明した．まず，半導体デバイスの研究，開発における現状を説明し，原子論的手法に基づく量子輸送デバイスシミュレータが必要となる背景について述べた．また，本研究の目的，本論文の構成について説明した．

第２章では，開発したシミュレータにおいて，原子論的効果を取り入れるために用いた強結合近似法の基礎について説明した．次に，量子輸送シミュレーションに組み込む際に重要となる，複素バンド構造の計算方法について説明し，強結合近似法を用いた非平衡グリーン関数法の計算方法について述べた．また，ポテンシャル構造を決定するために用いた，ポアソン方程式との自己無撞着計算について述べた．最後に，シミュレータに導入した高速化手法として，インターリーブ法，再帰グリーン関数法，ポアソン-ニュートン法について説明した．

第３章では，開発したシミュレータを用いて，極薄ダブルゲート型 Metal-Oxied Semiconductor Field-Effect Transistor (MOSFET)のデバイス輸送解析を行なった結果を記述した．まず，極薄チャネルにおいてサブバンド構造が複雑となるため解析の難しい，p型シリコンダブルゲートMOSFETにおける輸送特性の結晶方位依存性について述べた．次に，n型シリコンダブルゲートMOSFETにおける歪の影響について調べた結果を記述した．最後に，III-V族化合物半導体であるアンチモン化インジウムをチャネル材料として用いた，n型ダブルゲートMOSFETについて調べた結果を述べた．

第４章では，開発したシミュレータを用いて，直径が数ナノメートルのナノワイヤFETの輸送解析を行なった結果を記述した．まず，p型ナノワイヤFETについて計算した結果を述べた．チャネル材料としてシリコンまたはゲルマニウムを設定し，電流密度におけるナノワイヤの直径，結晶方位，ドーピング密度，断面形状の依存性を調

べた結果を記した．

第５章では，本論文を通して得られた結果をまとめ，結論を記した．

論文審査の結果の要旨

本論文では，微細な半導体デバイス中の物理現象を取り扱うことが可能な手法として，原子論的手法に基づく量子輸送シミュレーション技術を開発し，開発したシミュレーション技術を用いて微細な新構造，新材料デバイスの性能の予測を行い得られた知見について述べられている．得られた主要な結果を要約すると以下の通りである．

(1) 非平衡グリーン関数法に強結合近似法を導入することにより，フルバンド構造や歪効果，結晶方位依存性，スピン軌道相互作用などの原子論的効果が取り扱い可能な量子輸送シミュレーション技術を開発している．非平衡グリーン関数法に強結合近似法を導入すると莫大な計算量が必要となるが，非平衡グリーン関数法による計算を高速化する手法としてインターリーブ法を新たに提案し，シミュレーションに適用することで，3次元全ての方向について強結合近似法による原子論的な取り扱いを行った非平衡グリーン関数法による量子輸送計算を実現している．

(2) 開発した原子論的手法に基づく量子輸送デバイスシミュレーション技術を用いて，極薄ダブルゲート型 Metal-Oxied Semiconductor Field-Effect Transistor (MOSFET)のデバイス輸送解析を行い，極薄チャネルにおいてサブバンド構造が複雑となるため解析の難しい，p型シリコンダブルゲート MOSFET における輸送特性の結晶方位依存性について明らかにしている．また，極めて薄いチャネル層をもつためバルクとは異なるデバイス特性となると考えられる，n 型の歪シリコンダブルゲート MOSFET における歪の電流量への影響について明らかにしている．また，III-V族半導体であるアンチモン化インジウムをチャネル材料として用いたn型ダブルゲート MOSFET について輸送解析を行い，アンチモン化インジウムは非常に軽い有効質量をもつため，シリコンチャネルのデバイスに比べて多くのトンネル電流が流れることを示している．

(3) 開発した原子論的手法に基づく量子輸送デバイスシミュレーション技術を用いて，チャネル材料がシリコンまたはゲルマニウムの p 型ナノワイヤ FET の輸送解析を行ない，直径が数ナノメートルのナノワイヤでは電流密度の直径依存性があることを明らかにしている．また，ナノワイヤの断面形状によって電流密度が変化し，断面の形状が正方形のナノワイヤよりも円形のナノワイヤの方が電流密度が大きいことを示している．

以上のように，本論文は微細な半導体デバイスの解析には必要不可欠な，量子力学的効果と原子論的効果を取り扱うことが可能なデバイスシミュレーション技術を確立し，量子力学的効果が顕在化してくる領域において，フルバンド構造や歪効果，結晶方位依存性，スピン軌道相互作用を考慮したシミュレーションを実現している．本論文は，新構造，新材料を用いた微細な半導体デバイスのシミュレーションによる解析，設計を可能とするものであり，半導体デバイスを中心とした分野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．