



Title	半導体トランジスタの第一原理デバイスシミュレーション
Author(s)	森, 伸也
Citation	サイバーメディアHPCジャーナル. 2019, 9, p. 3-6
Version Type	VoR
URL	https://doi.org/10.18910/77143
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

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

The University of Osaka

半導体トランジスタの第一原理デバイスシミュレーション

森 伸 也

大阪大学 大学院工学研究科 電気電子情報工学専攻

1. はじめに

半導体デバイスの微細化が進み、いわゆる 7 nm プロセスで作製され、ゲート長が 20 nm を切るような、極めて微細なトランジスタ (Metal-Oxide-Semiconductor Field Effect Transistor, MOSFET) が量産化されています。MOSFET では、サイズの縮小がデバイスの高性能化につながるという、スケーリング則が成り立つため、これまで、高性能化を目指して微細化が行われてきました。しかし、デバイスが極度に微細化された結果、単純なスケーリング則のみによるデバイス性能向上の限界が顕在化してきました。すでに、平面型の MOSFET (図 1(a)) ではゲートの制御性が確保できなくなり、FinFET (図 1(b)) と呼ばれる立体構造のトランジスタが導入されています。ナノシートトランジスタ (図 1(c)) やナノワイヤトランジスタ (図 1(d)) と呼ばれる新構造の導入も検討されています。一方、チャネル材料として、化合物半導体や 2 次元系材料など、従来の Si とは異なる新しい材料を導入することにより、デバイス性能の向上を図るという試みもなされています。さらに、トンネルトランジスタや負性容量トランジスタなど、MOSFET と動作原理が異なるデバイスを導入することにより高性能化を達成することも検討されています。

以上のような新構造・新材料・新原理にわたる多くの選択肢の中から、デバイス開発の指針を早期に得るため、デバイス性能を予測できるシミュレータの開発が望まれています。性能予測のためのデバイスシミュレータの必要性は、古くから指摘されており、2002 年に発表された文献[1]で、すでに、「まず、未踏デバイスに対してその性能を予測し、デバイス開発戦略に役立てるという使い方がある。特に、各種のデバイスが候補にあがっている際に、デバイスの動作限界を知り、どのデバイスをターゲットに開

発するかということは非常に重要な決断である」と述べられています。ただ、計算機性能の問題などにより、新構造・新材料・新原理に柔軟に対応できるようなシミュレータはこれまでは実現されてきませんでした。しかし、近年、計算機の性能が著しく向上し、従来は困難なシミュレーションも実現可能になってきました。さらに、材料開発・材料探索の分野では、第一原理計算と呼ばれる、経験的な情報が必要としない計算手法が大きな成功を納めるようになってきました。以上のような背景のもと、我々は、文部科学省ポスト「京」重点課題⑦「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」の支援を受け、密度汎関数理論に基づくデバイスシミュレータの開発を行なっています。ここでは、その現状について紹介します。

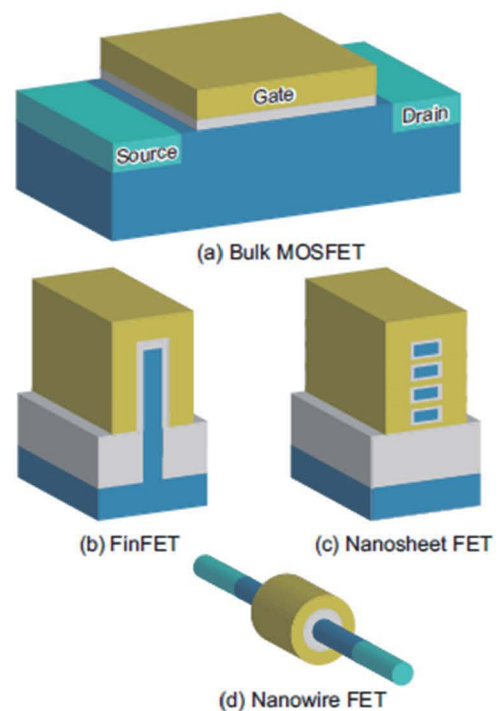


図1 MOS トランジスタ構造。(a)平面型の MOSFET、(b)立体型の FinFET、(c)ナノシート FET、(d)細いワイヤ形状のナノワイヤ FET。

2. デバイスシミュレーション手法

ドリフト拡散方程式など半古典的な輸送方程式に基づいた半導体デバイスシミュレータが一般的に用いられています [2, 3]。しかし、極めて微細なデバイスの輸送現象には、量子閉じ込めやトンネル効果など量子力学的な効果が重要な役割を演じます[4]。そのため、極微細デバイスを解析対象とする場合、量子効果を考慮できる手法を用いてシミュレータを開発することが必須です。我々は、非平衡グリーン関数(NEGF)法と呼ばれる計算手法を用いてシミュレータ開発を行なっています。NEGF 法では、電子状態を記述する系のハミルトニアンから計算されるグリーン関数が中心的な役割を演じます。従来、電子状態の記述には、有効質量近似、 $k \cdot p$ 近似、強束縛近似など、経験的な手法が用いられてきました。しかし、予測機能を持たせるためには、電子状態を第一原理的に求める必要があります。第一原理計算は、種々の定式化が可能です。デバイスシミュレータへの応用を図る場合、実空間メッシュを用いた形式が望ましいと考えられます。我々は、東京大学の押山研究室で開発された実空間密度汎関数 (Real-Space Density Functional Theory, RSDFT)法コード[5]を用いてデバイスシミュレータの開発を行なっています。

3. 第一原理デバイスシミュレータ開発におけるおもな課題

RSDFT-NEGF デバイスシミュレータの開発における主な課題は以下の通りです。

①ハミルトニアン行列のサイズ：NEGF デバイスシミュレータでは、空間を離散化することにより系のハミルトニアンを行列で表現し、ハミルトニアン行列と同サイズの行列の逆行列演算を実行し、系のグリーン関数行列を求めます。そのため、単純に数値計算を行うと、計算量は空間メッシュ数 N の 3 乗に比例して増加し、メッシュ数の違いが計算時間に大きな影響を及ぼします。たとえば、1 nm 直径の Si ナノワイヤの単位胞を考えます。有効質量近似を用いる場合、キャリア電子の波長より十分短い間隔

で空間を離散化する必要があります。室温において、Si 伝導電子の熱波長は 10 nm 程度なので、0.2 nm 間隔で空間を離散化すると、メッシュ数 N は 200 点程度になります。一方、単位胞に含まれる Si 原子数は 20 個程度なので、強束縛近似において、各原子に 10 個の原子軌道を考えると、“メッシュ数”はやはり 200 点程度になります。しかし、第一原理計算の場合、価電子帯の深い状態から電子状態を考慮する必要があるため、扱うべきエネルギー範囲が広くなり、典型的には 20,000 メッシュ点程度が必要となります。すなわち、単純に計算すると、第一原理計算は、経験的な有効質量近似や強束縛近似と比較して、 $(20,000/200)^3=1,000,000$ 倍程度の計算時間が必要になります。

②非平衡境界条件：電子状態のみの計算では、周期的な境界条件を課することができ、計算量を大幅に削減できます。しかし、デバイス中の状態は、ソース・ドレインから電子の出入りがあるため、周期的境界条件を課することができません。さらに、NEGF 法では、ソースとドレインとが独立に熱平衡にあり、互いに非平衡と仮定するため、一般的には、そのような非平衡境界条件が課せられたチャネルの電子状態を求める必要があります。

③電極の自己エネルギー：ソース・ドレイン電極は粒子溜めであり、十分大きいと仮定されます。NEGF 法では、ソース・ドレイン電極の状態は、電極の自己エネルギーと呼ばれる物理量を用いて記述されます。この電極の自己エネルギーを求めるためには、半無限の電極における散乱問題に関する一般化固有値問題を解かなくてはならず、計算のボトルネックとなります。

4. R 行列理論と等価モデル

我々は、 R 行列理論と等価モデルとを用いて上述の困難を回避したシミュレータの開発を行なっています。

R 行列理論は、共鳴核反応を記述するために Wigner と Eisenbud が提唱した理論です[6]。共鳴核反応を起こす内部領域と外部領域とに空間を分割

し、その境界で、2つの領域をつなぐ R 行列を定義し、散乱断面積などを求めるというのが基本的なアイデアです。デバイスの輸送問題にも応用でき、チャンネル（内部領域）とソース・ドレイン電極（外部領域）とにデバイスを分け、その境界で定義される R 行列から、グリーン関数を計算します[7]。 R 行列は電極が接続されていない閉じたチャンネルを記述するグリーン関数の表面成分に対応します。このことから、 R 行列理論を用いることにより、②の困難が解決できると期待されます。 R 行列理論を用いることにより、チャンネル領域の計算を、閉じた系の計算に変換でき、電極部分は別途計算すれば良くなります。

R 行列理論には、分割統治法的一种である R 行列伝搬法という計算手法が知られており、系を、任意のサイズに分割した小さい系の集まりとして、小さい系の R 行列から、系全体の R 行列を再帰的に計算できます [8]。これにより、①の困難が解決できると期待されます。

R 行列理論により、チャンネルと電極とを分割しても、依然、電極の自己エネルギーの計算は必要です。実際のデバイスでは、抵抗の低いオーミック電極が接続されている限り、デバイス特性は電極の詳細には依存しないと考えられます。数値計算においても、電極とチャンネルとの界面において反射が生じない限り、どのような電極を接続しても、デバイス特性は変わらないと考えられます。我々は、電極状態を等価モデル [9]を用いて記述することを試みています。等価モデルとは、大きなサイズのハミルトニアンが記述する広いエネルギー範囲の中で、任意の狭いエネルギー範囲のみを再現できる小さな基底系を抽出したモデルです。電極を等価モデルを用いて記述することにより、③の困難が解決できると予想されます。

5. シミュレーション結果

R 行列理論と等価モデルとを用いた RSDFT-NEGF デバイスシミュレータの実現に向けて、はじめに、一様な Si ナノワイヤの透過関数を計算しました。

電極部分を等価モデルで記述し、チャンネル領域を RSDFT で記述し、直径 1nm の Si ナノワイヤの透過関数の入射電子エネルギー依存性を計算しました。一様なナノワイヤの透過関数は、モード数で決まる整数値をとることが知られています。数値計算の結果、透過関数は数値誤差の範囲で、整数値となることを確認しました。このことから、等価モデルで記述した電極と RSDFT で記述したチャンネル領域との界面で、非物理的な反射が生じないことを確認しました。

つぎに、図2に示したように、可動電子状態のみを NEGF 自己無撞着ループに組み込んだプロトタイプを作成しました。すなわち、はじめに、RSDFT

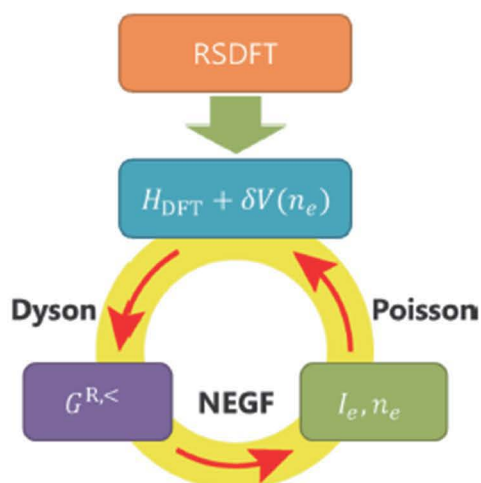


図2 NEGF自己無撞着計算。可動電子 ne の効果のみを、NEGF自己無撞着ループに取り込んだ場合。

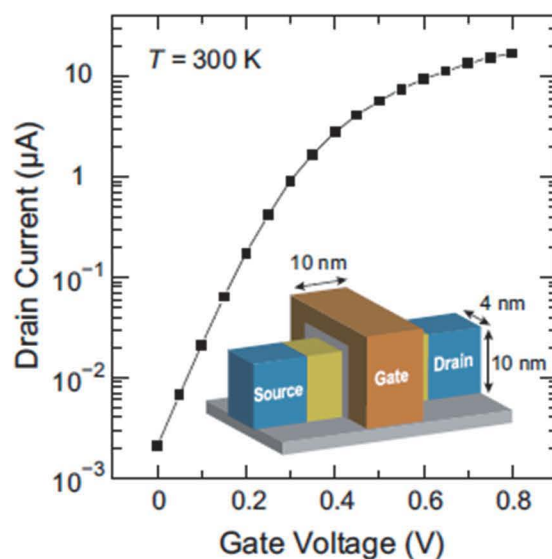


図3 Fin 高さ10nm、Fin 幅4nm、ゲート長10nmのSi FinFETの伝達特性

を用いて価電子帯も含めた電子状態を1回だけ計算しておき、そこで得られたハミルトニアンを用いて、デバイス内の可動電子状態を、NEGF 方程式とポアソン方程式との自己無撞着計算により決定し、伝達特性などのトランジスタ特性を計算しました。図3に、Fin 高さ10nm、Fin幅4nm、ゲート長10nm のSi FinFET の伝達特性の計算結果を示します。京コンピュータで実行し、1,536 CPU を利用し、およそ1 日で計算が完了しました。この計算では、電子状態をRSDFTにより求めているため、有効質量など、電子状態に関する経験的なパラメータの入力が不要です。

図3 の計算では、可動電子状態のみNEGF 自己無撞着ループ内に組み込んでいるため、非平衡状態におけるチャネル領域の誘電応答を考慮することができません。そのため、バルクSi の誘電率をパラメータとして入力して、ポアソン方程式を解いています。しかし、一般的には、ナノ構造中における誘電応答は、バルクの場合と異なると考えられます。そこで、チャネル領域における誘電応答を考慮するため、可動電子状態計算だけでなく、分極電子状態計算もNEGF 自己無撞着ループ内に組み込んだシミュレータを開発しました。図4 に、直径1nm、ゲート長6nm のSi ナノワイヤFET の伝達特性の計算結果を示します。青丸が分極電荷を考慮した場合の結果で

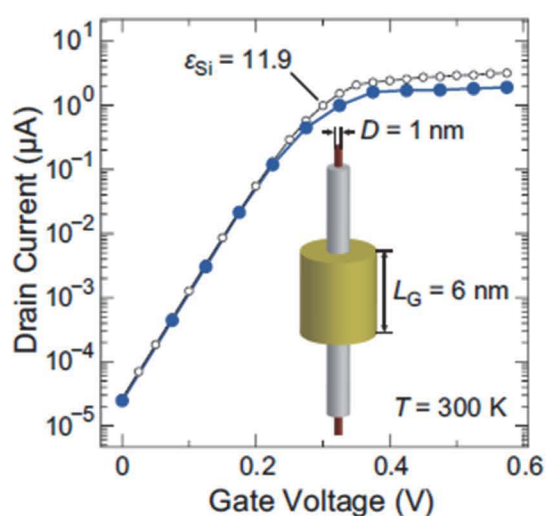


図4 直径1nm、ゲート長6nmのSiナノワイヤFETの伝達特性。青丸は分極電荷を考慮した結果、白丸はバルクSiの誘電率を仮定した結果。

あり、この計算では、誘電率という経験的なパラメータが不要です。図より、バルク Si の誘電率を仮定すると、オン電流を過大に評価することが分かります。

6. まとめと今後の展望

R 行列理論と等価モデルとを用いた、RSDFT-NEGF デバイスシミュレータの開発状況について紹介しました。現在、分極電荷を考慮しない場合、弾道輸送の範囲で、現実的なデバイスサイズのシミュレーションが可能になっています。しかし、分極電荷を考慮した場合、現状、直径 1nm 程度の小さなデバイスしか扱うことができません。また、室温・有限バイアス下でデバイスを動作させるため、フォノン散乱などの非弾性散乱過程の導入も不可欠です。これらの課題を解決し、予測機能を有するデバイスシミュレータを実現するためには、さらなる計算の効率化と適切なモデル化といった工夫に加え、計算機性能のさらなる向上も必要と考えています。

本研究は、大阪大学の美里劫夏南博士、アドバンスソフト（株）の岩田潤一博士、名古屋大学の押山淳教授との共同研究に基づくものです。

参考文献

- [1]西謙二、応用物理、**71**, 588 (2002).
- [2]森伸也、応用物理、**86**, 1075 (2017).
- [3]森伸也、応用物理、**87**, 44 (2018).
- [4]森伸也、三成英樹、応用物理、**78**, 540 (2009).
- [5] <https://github.com/j-iwata/RSDFT>
- [6] E. P. Wigner and L. Eisenbud, Phys. Rev., **72**, 29 (1947)
- [7] G. V. Mil'nikov, N. Mori, Y. Kamakura, and T. Ezaki, Appl. Phys. Express, **1**, 063001 (2008).
- [8] G. Mil'nikov, N. Mori, and Y. Kamakura, Phys. Rev. B, **79**, 235337 (2009).
- [9] G. Mil'nikov, N. Mori, and Y. Kamakura, Phys. Rev. B, **85**, 035317 (2012).