「次世代エレクトロニクスデバイスの創出に資する革新材料・プロセス研究」
平成21年度採択研究代表者

H22 年度
実績報告

森　伸也

大阪大学大学院工学研究科・准教授

原子論から始まる統合シミュレータの開発

§1. 研究実施の概要

本研究では，ナノスケール CMOS デバイスのキャリア輸送を記述するための学術基盤を確立し，材料選択・デバイス構造設計支援のための統合シミュレータの開発を目的とする．膨大な計算時間を要する原子論的電子輸送シミュレーションを新しい計算アルゴリズム（R 行列理論）の導入により高速化し，それに連続体モデル電子輸送シミュレーション，フォノン輸送シミュレーション，回路シミュレーションモデルを組み合わせることで統合シミュレータを開発する．電子輸送シミュレーションに関して，本年度は，R 行列量子輸送シミュレータの等価モデル導入によるさらなる高速化，ならびに，極微細 MOSFET の 2 次元ウィグナー・モンテカルロシミュレータのプロトタイプ開発を行った．フォノン輸送シミュレーションに関して，ナノワイヤ構造での電子・変調音響フォノン散乱計算をより現実的な MOSFET 動作に応用するためのモデル改善，および，準弾道的電子輸送とフォノン伝導を同時に取り扱うことのできる統合モンテカルロシミュレータのプロトタイプ開発を行った．回路シミュレーションモデルに関して，断面形状が四角形および円形の Gate-All-Around MOSFET における電流電圧特性コンパクトモデルの精度向上と計算式簡略化による明示的解析式表現を行った．

§2. 研究実施体制

(1) 「森」グループ

① 研究分担グループ長：森　伸也 （大阪大学大学院工学研究科，准教授）

② 研究項目

・ 原子論から始まる統合シミュレータの開発

・ 電気伝導―フォノン輸送統合シミュレータの開発

(2) 「土屋」グループ

① 研究分担グループ長：土屋　英昭（神戸大学大学院工学研究科，准教授）

② 研究項目

・ 連続体・粒子モデルに基づく量子輸送シミュレータの開発

(3) 「宇野」グループ

① 研究分担グループ長：宇野　重康 （名古屋大学大学院工学研究科，助教）

② 研究項目

・ 弾道および準弾道輸送コンパクトモデル開発

・ 電子フォノン散乱およびフォノン輸送モデリング

§3. 研究実施内容

原子論から始まる統合シミュレータの開発

本年度は R 行列非平衡グリーン関数法シミュレータのプロトタイプを用いて[原著論文9], p 型シリコンナノワイヤトランジスタにおける，歪みの効果およびスピン軌道相互作用の影響について調べた．その結果，価電子帯に形成されるオフバレーが重要な役割を演じることが分かった．さらに，ナノワイヤ表面付近に存在するらせん状軌道を考慮したモデルにより，オフバレー形成の起源を理解できることを見出した．

散乱の導入を目指したシミュレータ高速化に関して，原子論モデルに対する等価モデルを検討した．有効質量近似非平衡グリーン関数法では，計算量削減のための手法として，モード空間展開法が知られている．原子論においてこれに対応する手法が等価モデルである．原子論では，単純な有効質量近似と異なり，非物理的な状態を除去することが必須となる．本年度，等価モデルにおいて非物理的状態の除去を自動的に行える，変分法に基づくアルゴリズムを新たに開発した．このアルゴリズムを用いることにより，任意のデバイス構造に対して，自動的に等価モデルを構築することが可能となった．

より現実的なシリコンナノワイヤのデバイス特性を調べるため，また，TCAD との連携を行うため，本年度，分子動力学熱酸化シミュレーションにより得られたシリコン原子の配置（早稲田大学・渡邉孝信グループの結果）を入力可能なインターフェイスを開発した．予備的なシミュレーションを行った結果，シリコン原子位置の揺らぎが輸送特性に大きな影響を及ぼすことが分かった[図 1, 2].

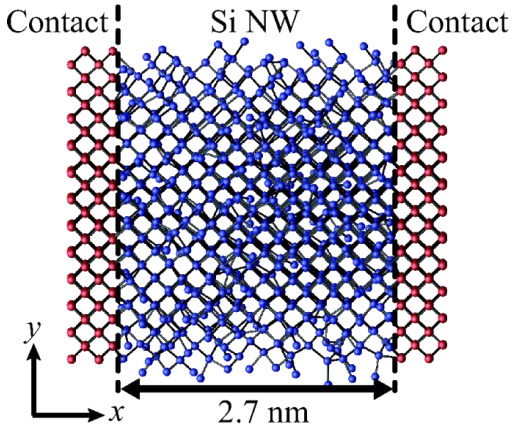

図 1 分子動力学熱酸化シミュレーションにより得られたシリコン原子の配置

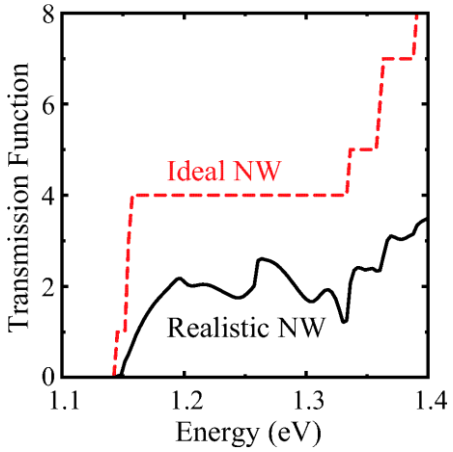

図 2 シリコンナノワイヤの伝導帯透過関数．実線が原子の位置揺らぎを考慮した場合．

電気伝導―フォノン輸送統合シミュレータの開発

チャネル長が 10 nm 程度の極微細 Si MOSFET を対象に，高エネルギーの電子注入にさらされる陽極（ドレイン）の格子温度上昇機構，およびそれが素子性能や寿命に与える影響についてシミュレーション解析を行った．素子内部の準弾道的電子輸送およびフォノン伝導を同時に取り扱

うことのできる統合モンテカルロシミュレータのプロトタイプを開発し，ターンオン後の素子内部の過渡的な温度分布の変化を求めた[図 3]．また，このシミュレータに取り入れるべき基礎的な熱伝導特性として，分子動力学シミュレーションの結果（早稲田大学・渡邉孝信グループの結果）を参照した．シミュレーションの結果，ドレインの温度は局所的に 100 度以上上昇する可能性があるが，電子伝導性能には致命的な悪影響を与えないことが分かった，ただし，温度上昇によって素子寿命が縮む可能性があり，その程度はシリコン層の厚みやシリコン/絶縁膜界面などの素子構造に強く影響されることが分かった．

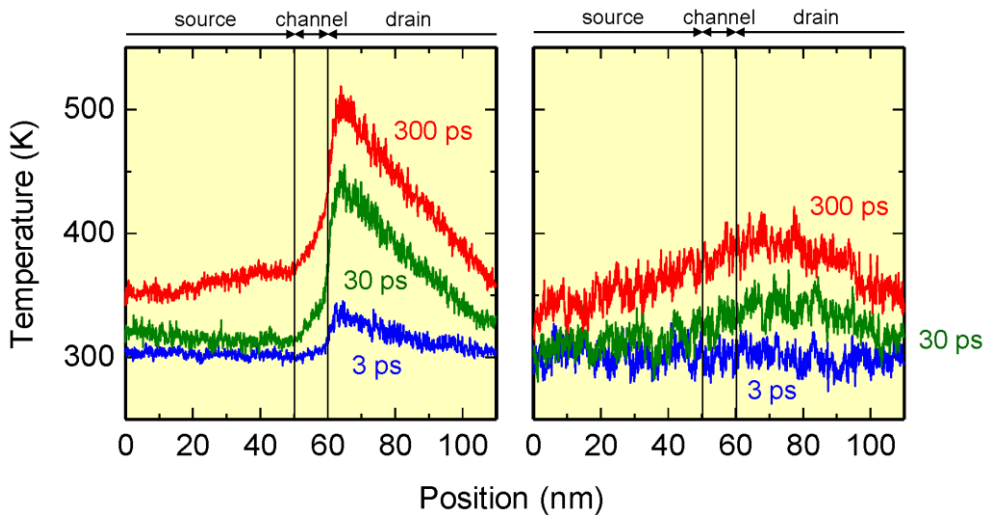

図 3 チャネル長 10 nm のシリコン nin 構造における光学フォノン（左図）および音響フォノン（右図）の温度分布．ドレイン電圧印加後 3, 30, 300 ps の場合．

連続体・粒子モデルに基づく量子輸送シミュレータの開発

MOSFET の微細化に伴い，ソース・ドレイン方向の量子輸送現象が重要になってきている．ソース・ドレイン間直接トンネリングやバンド間トンネリングがサブスレッショルド特性を劣化させることは広く知られているが，バリスティック輸送が顕在化する場合には，チャネルドレイン端での電子波の量子反射が無視できなくなり，電流駆動力の低下が懸念される．そこで本年度は，極微細 MOSFET の 2 次元ウィグナー・モンテカルロシミュレータのプロトタイプを開発し，ソース・ドレイン方向の量子干渉効果がデバイス特性に及ぼす影響を解析した．その結果，ゲート長が 6nm の極短チャネル素子では，散乱がある状況下でも量子反射効果が明瞭に観測されることを明らかにした[原著論文8，図 4]．また，メタルソース・ドレイン電極のモデル化を進め，ショットキーバリア低減のための不純物偏析技術への対応を行なった．さらに，我々のシミュレータから得られたポテンシャル分布や電子密度分布などの準バリスティック輸送データ[原著論文7]を名古屋大学グループに提供し，コンパクトモデル開発チームとの連携を強化した．

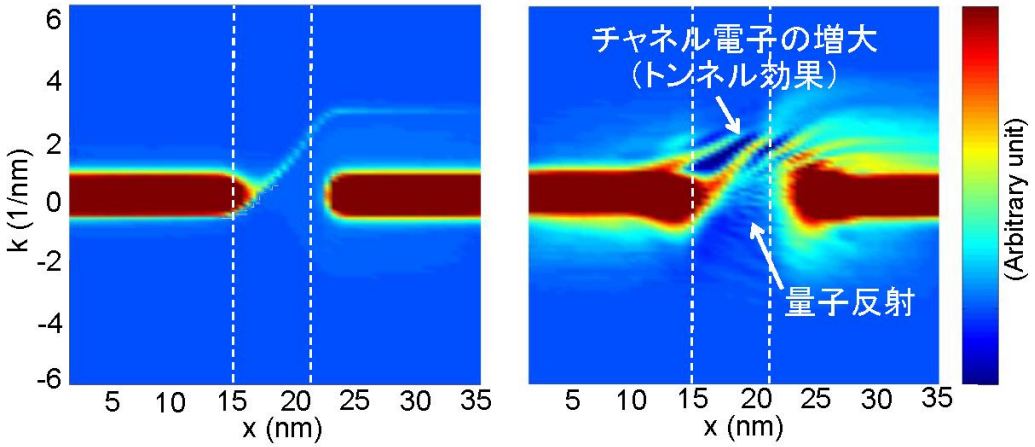

図 4 ゲート長 6nm のダブルゲート構造 MOSFET の電子分布関数．古典的モンテカルロ法（左図）および量子論的ウィグナーモンテカルロ法（右図）の結果．

弾道・準弾道輸送コンパクトモデル開発

今年度は断面が四角形および円形の Gate All Around (GAA) MOSFET における電流電圧特性コンパクトモデルの精度向上と計算式簡略化による明示的解析式表現に取り組んだ．従来の弾道・準弾道輸送コンパクトモデルでは電流ボトルネックとなるチャネル領域での静電ポテンシャル決定においてソースおよびドレインの影響を無視している．これは短チャネル効果を無視していることに対応するが，弾道・準弾道輸送が重要となる現実的なチャネル長の MOSFET では短チャネル効果が無視できないと考えられる．これを取り入れるために，チャネル内での伝導方向ポテンシャルプロファイルの再現を試みた．具体的には，ソース・ドレインによる影響を考慮しないモデルにおいてチャネルに沿ったワイヤ軸上での位置に依存する補正項を加え，その補正因子が満たすべき微分方程式を解く方法を検討した．一方，計算式簡略化による明示的解析式表現については，回路シミュレータへの組み込みに適した，数値計算を一切必要としないモデル開発を試みた．計算式を簡略化するために，基底サブバンドのみを考慮，サブバンドエネルギーの解析式表現の摂動論による記述などを行った．さらに，ポテンシャル形状を決定するパラメータのサブスレッショルド領域および強反転領域での解析的近似式を導出し，それらを滑らかに接続する解析関数を導入した．これにより，本研究のコンパクトモデルを明示的かつ解析的な数式で表現し，数値計算を要する手法による結果との良好な一致を得た[図 5]．そして Verilog-A による回路シミュレータ（HSPICE）への組み込みを行い，基本的インバータ回路の静特性シミュレーションの実証を行った．

電子フォノン散乱およびフォノン輸送モデリング

今年度は板構造及びナノワイヤ構造での電子・変調音響フォノン相互作用に関する今までの知見を整理すると共に，ナノワイヤ構造での電子・変調音響フォノン散乱計算をより現実的な MOSFET 動作に応用するためのモデル改善を行った．前者については，ナノ構造における音響フォノン変調およびその電子との相互作用を定式化し比較する方法について系統的に整理した．

後者については，自主開発した Schrödinger-Poisson 自己無撞着ソルバーによって電子波動関数がゲート電圧印加によって変調される様子を計算し[図 6]，それによる電子・変調音響フォノン散乱の強度変化を系統的に調査した．

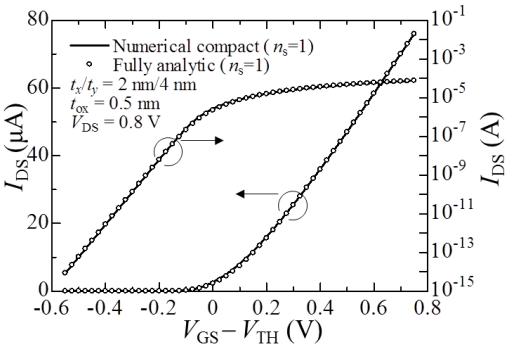

図 5 四角断面シリコン GAAMOSFET 弾道輸送電流電圧特性の，数値計算を要する従来手法と要しない新手法による結果の比較

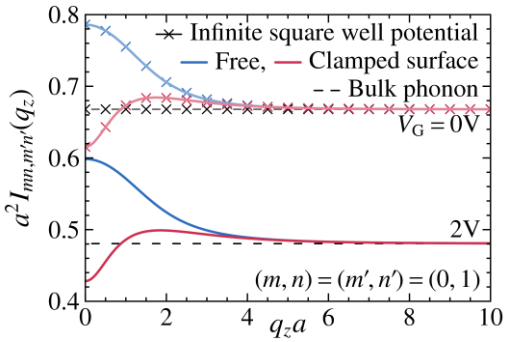

図 6 円筒形シリコン GAAMOSFET での電子・変調音響フォノン相互作用形状因子のゲート電圧及びフォノン境界条件依存性

§4. 成果発表等

（4－1） 原著論文発表

●論文詳細情報

1. S. Uno, J. Hattori, K. Nakazato, and N. Mori, “Form factor increase and its physical origins in electron-modulated acoustic phonon interaction in a free-standing semiconductor plate,” Mathematical and Computer Modelling, Vol. 51, pp. 863-872, 2010.
2. H. Minari and N. Mori, “A computationally cost-effective interleaving method for atomistic non-equilibrium Green's function simulation,” Mathematical and Computer Modelling, Vol. 51, pp. 888-892, 2010.
3. T. Numata, S. Uno, K. Nakazato, Y. Kamakura, and N. Mori, “Analytical compact model of ballistic cylindrical nanowire metal-oxide-semiconductor field-effect transistor,” Japanese Journal of Applied Physics, Vol. 49, pp. 04DN05 (1-6), 2010.
4. Y. Kamakura, G. Mil'nikov, N. Mori, and K. Taniguchi, “Impact of Attractive Ion in Undoped Channel on Characteristics of Nanoscale Multigate Field Effect Transistors: A Three-Dimensional Nonequilibrium Green's Function Study,” Japanese Journal of Applied Physics, vol. 49, No. 4, pp. 04DC19 (1-5), 2010.

5. N. Mori and H. Minari, “Impact of interface roughness on threshold- voltage variation in ultrasmall gate-all-around and double-gate field-effect transistors,” Japanese Journal of Applied Physics, Vol. 49, pp. 04DC05 (1-4), 2010.
6. H. Minari and N. Mori, “Hole transport mechanism in silicon and germanium nanowire field effect transistors,” Japanese Journal of Applied Physics, Vol. 49, pp. 04DN04 (1-4), 2010.
7. H. Tsuchiya, A. Maenaka, T. Mori, and Y. Azuma, “Role of Carrier Transport in Source and Drain Electrodes of High-Mobility MOSFETs,” IEEE Electron Device Letters, Vol. 31, No. 4, pp. 365-367, 2010.
8. S. Koba, R. Aoyagi and H. Tsuchiya, “Quantum Transport Simulation of Nanoscale Semiconductor Devices Based on Wigner Monte Carlo Approach,” Journal of Applied Physics, Vol. 108, No. 6, 064504, 2010.
9. G. Mil'nikov, N. Mori, and Y. Kamakura, “Application of the R-matrix method in quantum transport simulations: Tight-binding model,” Journal of Computational Electronics, Vol. 9, No. 3, pp. 256-261, 2010.
10. Y. Kamakura, T. Zushi, T. Watanabe, N. Mori, and K. Taniguchi, “Impact of Self-Heating Effect on the Electrical Characteristics of Nanoscale Devices,” Key Engineering Materials, Vol. 470, pp. 14-19, 2011.
11. N. Mori, Y. Kamakura, G. Mil'nikov, and H. Minari, “Discrete Dopant Effects on Threshold Voltage Variation in Double-Gate and Gate-All-Around Metal-Oxide-Semiconductor Field-Effect-Transistors,” Key Engineering Materials , Vol. 470, pp. 218-223, 2011.