

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. 研究実施体制

(1) 「森」グループ

- ① 研究代表者: 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 主たる共同研究者: 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 主たる共同研究者: 宇野 重康 (立命館大学理工学部, 准教授)
- 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

(4) 「伊藤」グループ

- ① 主たる共同研究者: 伊藤 公平 (慶應義塾大学理工学部, 教授)
植松 真司 (慶應義塾大学大学院理工学研究科, 特任教授)
- ② 研究項目
 - ・ ナノワイヤ CMOS プロセスシミュレーション開発
 - ・ 量子輸送モデル等の汎用 TCAD への移行

§ 2. 研究実施の概要

プロセスシミュレータによって構築した現実的なヒ素原子配置を量子輸送シミュレーションに導入した。3 nm × 3 nm と 5 nm × 5 nm シリコンナノワイヤにおけるシミュレーションを行い、断面の大きさが、チャンネル領域に侵入した離散ヒ素原子によるばらつきに与える影響を調べた。ヒ素原子の侵入深さは 3 nm と 5 nm ナノワイヤでほぼ同じであったにも関わらず、しきい値電圧のばらつきは 3 nm ナノワイヤの方が小さかった。これにより、ナノワイヤサイズが小さいことによるゲート制御性の高さが、不純物の離散配置によるしきい値ばらつきの抑制に有効であることが分かった。

等価モデルの範囲でばらつきを統一的に扱う方法を拡張し、原子論モデルの範囲においてナノワイヤトランジスタのばらつきを計算するプログラムを開発し、原子配置乱れによるばらつきを計算した。ナノ CMOS プロセスシミュレーションと量子輸送シミュレータとの結合に関して、新たに 5 nm × 5 nm シリコンナノワイヤにおけるシミュレーションを行い、断面の大きさが離散不純物によるばらつきに与える影響、およびフォノン散乱の影響を調べた。

ウィグナー・モンテカルロシミュレータを用いて、III-V チャンネル MOSFET のソース・ドレイン (SD) 直接トンネリングの影響について調べた。特に、これまでの研究で対象としてきた InP MOSFET に加えて、現在実験的に最も研究が進んでいる InGaAs MOSFET にも適用できるようにシミュレータの機能を拡張した。III-V チャンネル MOSFET ではチャンネル長が 20 nm 以下の領域で、SD 直接トンネル電流が発生した。InP よりも軽い有効質量を持つ InGaAs MOSFET において、より顕著な SD 直接トンネル電流の増大を確認した。また、Si MOSFET のウィグナー・モンテカルロシミュレータに、準バリスティック輸送係数を抽出する機能を新たに追加した。

コンパクトモデル開発において、円筒形 Gate All Around MOSFET のサブスレッショルド領域におけるチャンネルに沿ったポテンシャル分布を、Laplace 方程式の解析近似解により表現し、長チャンネルモデルに組み込むことで、電子閉じ込めサブバンドレベルのチャンネル内プロファイルを解析式で表した。このサブバンドプロファイルを用いて弾道輸送電流を計算することにより、トランジスタ電流電圧特性のサブスレッショルド特性が数値シミュレーション結果とよく一致することを確認した。並行して、チャンネル長 5 nm 以下で顕著に表れることが予想されるソース・ドレイン間トンネル電流の簡易モデル化、ダブルゲート MOSFET コンパクトモデルの開発を行った。

原子論的アプローチによるシリコンナノワイヤでの弾道フォノン輸送計算において、半導体デバイスで現実的に用いられるボロン、リン、ヒ素、アルミなどの不純物原子を導入した計算を行った。新たに Stillinger-Weber ポテンシャルに基づく原子間力を取り入れることにより、不純物原子の質量の違いだけでなく周辺シリコン原子との結合定数の違いも含めた計算を可能にした。

モンテカルロ法によるフォノン輸送シミュレータが完成し、それを用いて微細 Si 構造(薄膜, ワイヤ)中の熱伝導解析を行った。また、電子輸送に関するモンテカルロシミュレータとの結合を行い、ダブルゲート型 MOSFET の過渡応答に自己発熱効果が与える影響を解析した。

本課題で開発される量子輸送シミュレータが、実際に多くのユーザーによって次世代ナノデバイスの性能予測に活用されるように、量子輸送シミュレーションと HyENEXSS との接続を行った。ユーザーフレンドリー化を図るために、HyENEXSS の入力ファイルを共通に用いてシミュレーションを行い、出力結果も HyENEXSS の標準グラフィックソフト sgplot で表示できるようにした。

§ 3. 成果発表等

(3-1) 原著論文発表

論文詳細情報(国内)

論文詳細情報(国際)

1. N. Mori, M. Tomita, H. Minari, T. Watanabe, and N. Koshida, "Disorder-induced enhancement of avalanche multiplication in a silicon nanodot array," *Japanese Journal of Applied Physics*, Vol. 52, No. 4, pp. 04CJ04 (1-4), 2013. (DOI: 10.7567/JJAP.52.04CJ04)
2. G. Mil'nikov, N. Mori, and Y. Kamakura, "Scattering basis representation in ballistic transport simulations of nanowire transistors," *Mathematical and Computer Modelling*, Vol. 58, No. 1-2, pp. 312-320, 2013. (DOI: 10.1016/j.mcm.2012.11.011)
3. G. Mil'nikov and N. Mori, "Universal conductance statistics in a backscattering model: Solving the Dorokhov-Mello-Pereyra-Kumar equation with $\beta = 1, 2$, and 4," *Physical Review B*, Vol. 88, pp. 155406 (1-12), 2013. (DOI: 10.1103/PhysRevB.88.155406)
4. S. Koba, Y. Maegawa, M. Ohmori, H. Tsuchiya, Y. Kamakura, N. Mori, and M. Ogawa, "Increased Subthreshold current due to source-drain direct tunneling in ultrashort channel III-V metal-oxide-semiconductor field-effect transistors," *Applied Physics Express*, Vol. 6, pp. 064301 (1-4), 2013. (DOI: 10.7567/APEX.6.064301)
5. N. Mori, M. Tomita, H. Minari, T. Watanabe, and N. Koshida, "Effects of atomic disorder on impact ionization rate in silicon nanodots," In Thomas Ihn, Aleksey Kozikov, and Clemens Rossler, editors, *AIP Conference Proceedings*, Vol. 1566, pp. 381-382, 2013. (DOI: 10.1063/1.4848445)
6. K. Kukita and Y. Kamakura, "Monte Carlo simulation of phonon transport in silicon including a realistic dispersion relation," *Journal of Applied Physics*, vol. 114, no. 15, pp. 154312 (1-8), 2013. (DOI: 10.1063/1.4826367)
7. S. Koba, M. Ohmori, Y. Maegawa, H. Tsuchiya, Y. Kamakura, N. Mori, and M. Ogawa, "Channel length scaling limits of III-V channel MOSFETs governed by source-drain direct tunneling," *Japanese Journal of Applied Physics*, Vol. 53, 04EC10 (1-5), 2014. (DOI: 10.7567/JJAP.53.04EC10)
8. K. Kukita, I. N. Adisusilo, and Y. Kamakura, "Monte Carlo simulation of thermal conduction in silicon nanowires including realistic phonon dispersion relation," *Japanese Journal of Applied Physics*, vol. 53, No. 1, pp. 015001 (1-5), 2014. (DOI: 10.7567/JJAP.53.015001)

9. S. Kaneko, H. Tsuchiya, Y. Kamakura, N. Mori, and M. Ogawa, "Theoretical performance estimation of silicene, germanene, and graphene nanoribbon field-effect transistors under ballistic transport," *Applied Physics Express*, Vol. 7, pp. 035102 (1-4), 2014. (DOI: 10.7567/APEX.7.035102)
10. N. Mori, T. Edagawa, Y. Kamakura, and L. Eaves, "Nonequilibrium Green function simulations of graphene-nanoribbon resonant-tunneling transistors," *Japanese Journal of Applied Physics*, Vol. 53, No. 4S, pp. 04EN04 (1-5), 2014. (DOI: 10.7567/JJAP.53.04EN04)
11. K. Kukita, I. N. Adisusilo, and Y. Kamakura, "Monte Carlo simulation of diffusive-to-ballistic transition in phonon transport," *Journal of Computational Electronics*. (DOI: 10.1007/s10825-013-0511-6)