

第一原理デバイスシミュレーションに向けて



研究ノート

森 伸也*

Towards the first-principles device simulation

Key Words : semiconductor, silicon, field-effect transistor, device simulation, quantum transport

1. はじめに

半導体デバイスの微細化が進み、Si MOSFETのチャンネル長は既に30nmを切っています。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、高性能化を目指した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性能向上の限界が顕在化しています。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と呼ばれる立体構造のトランジスタ(図1(b))が導入されています。また、チャンネルを細いワイヤ形状とし、その周りにゲート電極を設けたナノワイヤFET(図1(c))とすることにより、さらなる微細化が図れると期待されています。一方、チャンネル材料として、化合物半導体やグラフェンに代表される2次元系材料など、Siとは異なる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FETなど、MOSFETと動作原理が異なるデバイスの導入も検討されています。

以上のような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

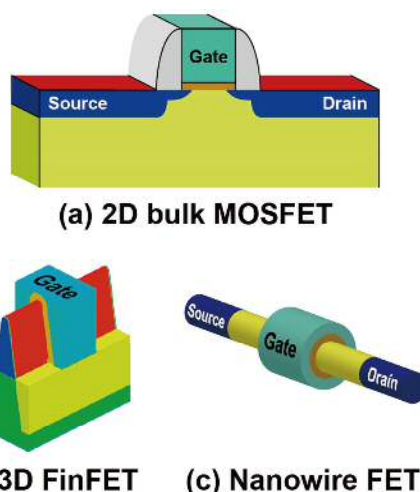


図1 MOSトランジスタ構造。
(a) 平面型のMOSFET, (b) 立体型のFinFET,
(c) 細いワイヤ形状のナノワイヤFET.

ら指摘されており、西謙二先生の解説論文(応用物理71, 588 (2001))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、その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、特に、材料開発・材料探索の分野では、第一原理計算と呼ばれる、経験的な情報を必要としない計算手法が大きな成功を収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、第一原理計算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。

2. デバイスシミュレーション手法

極めて微細なデバイスの輸送現象には、量子閉じ



* Nobuya MORI

1963年4月生
大阪大学大学院工学研究科電子工学専攻
(1991年)

現在、大阪大学 大学院工学研究科電気
電子情報工学専攻 教授 工学博士
半導体デバイス

TEL : 06-6879-7791

FAX : 06-6879-7791

E-mail : nobuya.mori@eei.eng.osaka-u.ac.jp

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。そのため、量子効果を考慮できる手法を用いてシミュレーションを行うことが必須です。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、電子状態の計算には、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が、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 (RSDFT) 法コードを用いてシミュレータ開発を行なっています。

3. 解決すべきおもな課題

RSDFT-NEGF デバイスシミュレータの開発におけるおも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法では、系のハミルトニアンを離散化して行列で表現します。1 nm 直径の Si ナノワイヤの単位胞を考えます。伝導電子の熱波長は 10 nm 程度なので、有効質量近似において、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 21 個なので、各原子に 10 個の原子軌道と考えた経験的強束縛近似では、“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ため、エネルギー範囲が広く、典型的には 20,000 メッシュ点程度が必要となります。単純に数値計算を行うと、計算量は N の 3 乗に比例して増加するため、このメッシュ数の違いは計算時間に非常に大きな影響を及ぼします。

②非平衡境界条件：電子状態の計算では、周期的な境界条件を課すことができます。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、周期的境界条件を用いることができません。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：NEGF法では、ソース・ドレインの状態は、電極の自己エネルギーで記述されます。こ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、現在、 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試みています。

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。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というのが基本的なアイデアです。デバイス中の輸送問題にも応用でき、チャネル (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。 R 行列は電極が接続されていない閉じたチャ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。チャネル領域の計算を、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、分割統治法の一つである 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可能です。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。計算においても、電極とチャネル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

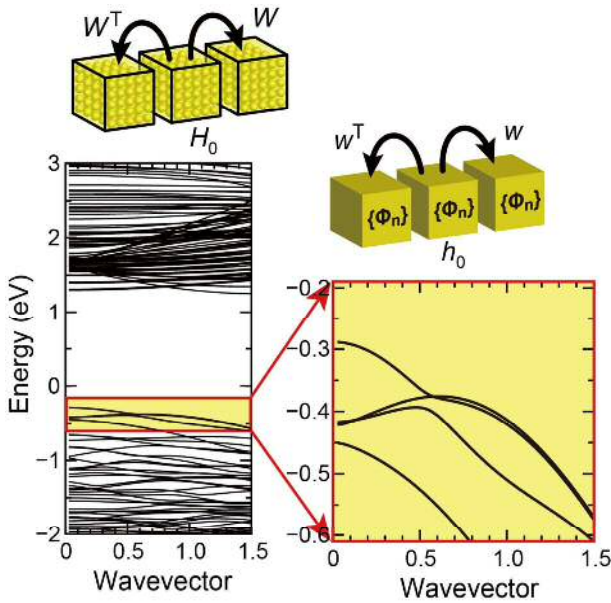


図2 大きなサイズのハミルトニアン H_0 が記述する広いエネルギー範囲の中で、任意の狭いエネルギー範囲のみを再現する小さな基底系 $\{\Phi_n\}$ を抽出した等価モデル。

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 (図2)。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。

現在は、以上に述べたアイデアに基づき RSDFT-NEGF デバイスシミュレータのプロトタイプを作成し、正しく動作することを確認した段階です (図3)。

5. まとめと今後の展望

R 行列理論と等価モデルとを用いることにより、RSDFT-NEGF デバイスシミュレータの実現に向けて一歩前進しました。しかし、現状、RSDFT 部分は NEGF 自己無撞着ループ外に位置しています。また、ポアソン方程式との連成においても、RSDFT 部分は固定されているなど、まだ不十分です。さらに、デバイスは、室温・有限バイアス下で動作させるため、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ソフトウェア上の工夫に加え、計算機性能のさらなる向上が必要と考えています。

本研究は、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」の一環として実施したもので、大阪大学の美里劫夏南博士、東京大学の岩田潤一博士、押山淳教授との共同研究に基づくものです。また、計算の一部は、大阪大学サイバーメディアセンターのスーパーコンピュータ SX-ACE を用いて行いました。

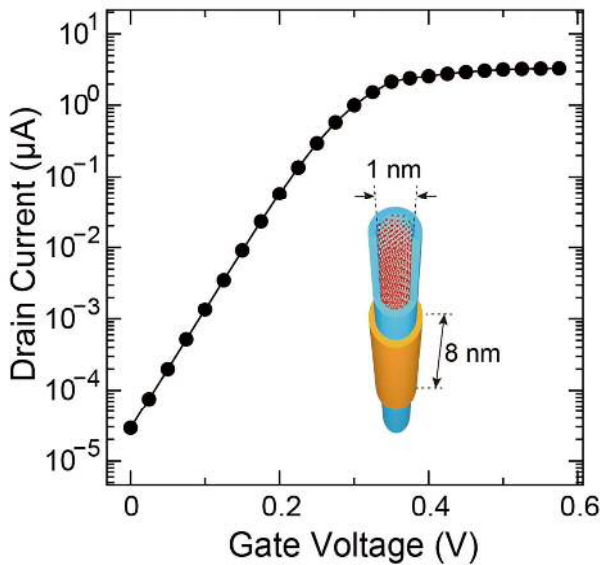


図3 直径1 nm、ゲート長8 nmのSiナノワイヤFETの伝達特性