ナノデバイスのシミュレーション：なぜ、モンテカルロ法か？

Simulation for Nano-Scale Devices: Why Monte Carlo method?

筑波大電物 ○佐野 伸行

Univ. Tsukuba, °Nobuyuki Sano

E-mail: sano@esys.tsukuba.ac.jp

(数年以上も前に信頼性の高いシミュレーションによって予測されていたように) スケーリング則にのっとった単純な半導体デバイスの微細化傾向は今や鈍化し、デバイス構造の 3 次元化あるいは新材料のチャネルへの適用などで単純スケーリングと同等の優位性を達成するための研究が進行している。しかしながら、いずれの研究においても、ナノスケール化したデバイスサイズが今後大きくなることはないであろう。そして、ナノスケール領域の構造を有するデバイスが、将来デバイスとして解析の対象となることに相違ない。その際、信頼性の高い特性予測のためには、物理原理に基づいた (必然的に長い計算時間を要する) 数値シミュレーションがこれまで以上に重要とみなされるであろう。

そこで本講演では、ナノスケール領域にあるデバイスのシミュレーションにおいて留意すべきさまざまな問題について、過去 10 年ほどの半導体デバイスにおける電子輸送理論および数値解析の彷徨を振り返りながら概説する [1]。

問題の第一は、キャリアの輸送特性は時間に関して不可逆な輸送方程式を解くことで得られ、可逆な運動方程式では決して整合性は得られないという事実である。これは、ナノチャンネルにおける電子輸送の物理機構を正しく理解するうえで、本質的に重要である。第二に、輸送方程式は境界値問題であり、当然ながら、正しい境界条件のもとで解くことが不可欠ということである。第三は、正しい境界条件を設定するうえで、電子間や電子不純物間のクーロン相互作用の導入がシミュレーションや理論解析において不可避になるということである。第四は、ナノスケールで顕在化してくる (と主張されている) 量子効果の意味を正しく理解する必要性である。閉じ込めやトンネル現象で見られる量子効果の重要性については、疑いの余地はない。一方、解放系であるデバイスのチャネル方向における量子効果が何を意味するかは自明ではなく、その意味を正しく把握する必要がある。本講演では、これらの問題に関して、モンテカルロ法の有意性と問題点をからめて議論することで、ナノデバイスにおけるモデリングとシミュレーションについての将来展望について述べる。

【参考文献】

- [1] 佐野伸行、応用物理学会誌、76 巻、pp.1135-1141 (2007); 佐野伸行、電気学会誌、129 巻、pp. 796-799 (2009); N. Sano, IMFEDK, pp.22-23 (2011).