

高速半導体素子のためのデバイス・シミュレーションの物理モデル

Physical Models of Device Simulation for the High-Speed Semiconductor Devices

リンク・リサーチ株式会社 ○武藤 秀樹

Link Research Corporation, ○Hideki Mutoh

E-mail: hideki.mutoh@nifty.com

【はじめに】半導体素子の微細化とともに素子の高速化が進んでおり、近い将来 MOS-Tr の THz オーダーの動作周波数が達成されようとしている。素子の高速化が進むと、電極電位の変化に伴う基板内での電場変化の遅れが無視できなくなる。電磁場の伝播を考慮しながらデバイス・シミュレーションを実行する場合、マクスウェル方程式を解きながら電荷の挙動を計算する必要が有るが、この計算には深刻な問題が存在することがわかってきた。

【物理モデル】マクスウェル方程式は以下の式で表される。

$$\mathbf{J} = \nabla \times \mathbf{H} - \varepsilon \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}, \quad \rho = \varepsilon \nabla \cdot \mathbf{E}, \quad (1)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} + \mu \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} = 0, \quad \nabla \cdot \mathbf{H} = 0. \quad (2)$$

(1) 式から直ちに以下の電荷保存則が導かれる。

$$\nabla \cdot \mathbf{J} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \quad (3)$$

ここで、 ρ は電荷密度、 $\mathbf{J}$ は電流密度、 $\mathbf{H}$ は磁場ベクトル、 $\mathbf{E}$ は電場ベクトル、 ε は誘電率、 μ は透磁率を表し、 ε と μ は c を光速とすると、 $\varepsilon\mu = 1/c^2$ を満たす。一方、デバイス・シミュレーションは以下のポワゾン方程式と電流連続式を基本としている。

$$\varepsilon \nabla^2 \psi = -q(N_D - N_A + p - n), \quad (4)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{J}_p + q \frac{\partial p}{\partial t} = GR, \quad \nabla \cdot \mathbf{J}_n - q \frac{\partial n}{\partial t} = -GR. \quad (5)$$

ψ は電位、 n は電子密度、 p はホール密度、 N_D はドナー濃度、 N_A はアクセプタ濃度、 $\mathbf{J}_n$ と $\mathbf{J}_p$ はそれぞれ電子とホールの電流密度、 q は単位電荷、 GR は電荷生成再結合レートを表す。マクスウェル方程式は線型の微分方程式であり、重ね合わせの原理を満たすので、ホールと電子それぞれに対して(1)-(3)が成り立たなければならないが、 $GR \neq 0$ のとき(5)は(3)と矛盾する。また、ゲート電極にパルス電圧を印加する場合、計算上の仮定ではゲート電極部で $\nabla \cdot \mathbf{J} = 0$ であるが $\partial \rho / \partial t \neq 0$ なので(3)を満たさず、シリコン内の電極で定常電流を計算する場合には $\nabla \cdot \mathbf{J} \neq 0$ だが $\partial \rho / \partial t = 0$ なのでやはり(3)を満たさない。これらの問題を解決するために、かつて Fermi が量子電磁力学において電磁場のラグランジアンを導出するために用いた手法¹⁾と類似した手法を用いる。新たに電場、磁場に加えて以下の式で定義されるスカラー場 γ を導入する。

$$\gamma = \nabla \cdot \mathbf{A} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial \psi}{\partial t}. \quad (6)$$

ただし $\mathbf{A}$ はベクトル・ポテンシャルを表す。 $\square$ をダランベルシアン ($\square \equiv \nabla^2 - \partial^2 / c^2 \partial t^2$) とするとき、 $\gamma = 0$ のローレンツ・ゲージの場合と同様、 $\gamma \neq 0$ の場合も以下の関係が成り立つと仮定する。

$$\mu \mathbf{J} = -\square \mathbf{A}, \quad \rho = -\varepsilon \square \psi. \quad (7)$$

すると(1)は以下のように書き換えられる。

$$\mathbf{J} = \nabla \times \mathbf{H} - \varepsilon \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} - \frac{1}{\mu} \nabla \gamma, \quad \rho = \varepsilon \nabla \cdot \mathbf{E} + \varepsilon \frac{\partial \gamma}{\partial t}. \quad (8)$$

上式から GR を求めると、

$$GR = \nabla \cdot \mathbf{J} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{1}{\mu} \square \gamma. \quad (9)$$

すなわちスカラー場 γ の存在により、(5)を満たすことができる。(2)、(5) および (8) を組み合わせて用いることにより、電磁場の伝播を考慮しながらデバイス・シミュレーションを行うことが可能になる。

【計算例】3次元デバイス・シミュレータ SPECTRA²⁾に上記のモデルに基づく FDTD 法³⁾プログラムを組み込み、図 1 (a) に示す構造の電場および電荷分布の 2次元過渡解析を行った。今回は磁場 $\mathbf{H}$ を無視して電場 $\mathbf{E}$ とスカラー場 γ およびホール・電子濃度 p と n に関して逐次代入を行うことにより計算を行った。図 1 (b) ~ (d) に示すように、ゲート電極に 0.1ps の立ち上がり時間のパルスを印加すると、電場の伝播に伴い 1ps 程度の時間内において従来のシミュレーションでは得られなかった大きな電位分布の変動が生じることがわかる。

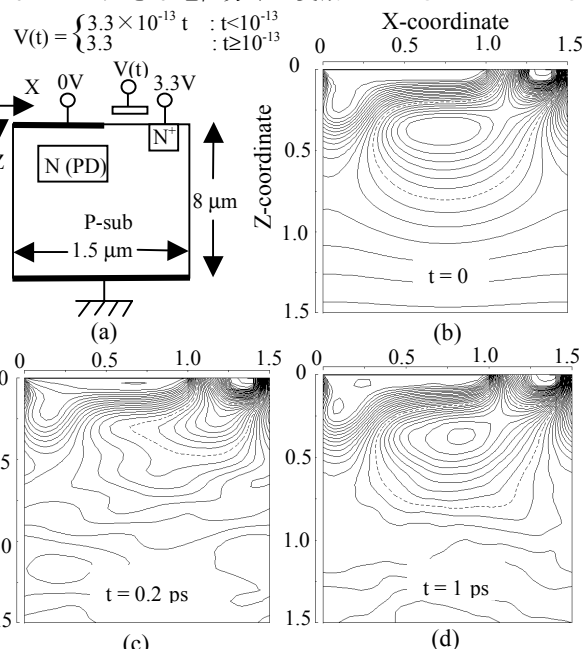


図 1 CMOS イメージセンサ画素構造 (a) と電位分布 (等高線間隔: 0.1V, b: $t=0$, c: $t=0.2$ ps, d: $t=1$ ps)

[参考文献]

- 1) S. S. Schweber: "An Introduction to Relativistic Quantum Field Theory," Harper & Row, New York, p. 242 (1962).
- 2) H. Mutoh: IEEE Trans. Electron Devices, **50**, pp. 19-25 (2003).
- 3) A. Taflov: "Computational Electrodynamics," Artech House, Norwood, MA (1995).