18p-A16-5

自己鏡像ポテンシャルのナノデバイスシミュレーションへの導入

Implementation of Self-Image Potential into Nano-Device Simulations

筑波大電物　°土屋 耀介，吉田 勝尚，佐野 伸行

Inst. Appl. Phys, Univ. of Tsukuba °Yosuke Tsuchiya, Katsuhisa Yoshida, Nobuyuki Sano

E-mail: tsuchiya@hermes.esys.tsukuba.ac.jp

【はじめに】ナノスケール半導体デバイスにおいては、ゲート絶縁膜界面に伴った自己鏡像ポテンシャルの影響を電子は強く受けて伝導する[1,2]。しかしながら、鏡像ポテンシャルは電子自身のクーロンポテンシャルに伴った自己エネルギーの効果であることから、種々のデバイスシミュレーションでその効果が導入されているかどうかは自明ではない。前回我々は、ゲート電極、SiO_2 或いは high-k 絶縁膜に伴った自己鏡像ポテンシャルの効果と、自己無撞着モンテカルロシミュレーション（SCMC）における自己鏡像ポテンシャル導入の可能性について考察を行った[2]。本報告では、連続体近似のシミュレーションでは自己鏡像ポテンシャルは導入し得ないこと、また（波束程度の広がりをもつ）電子の SCMC では定量的にほぼ正しく鏡像ポテンシャルが導入されることを明らかにする。

【計算手法】 ダブルゲート MOSFET 構造のもとで、ポアソン方程式と自己無撞着に結合したアンサンブルモンテカルロシミュレーションで、電子に作用するクーロン力を 2 通り（すべての電子を含めたポアソン方程式から求まるクーロン力と、着目する電子以外の電子分布から受けるクーロン力）で計算し、それらの差分を取ることで自己鏡像ポテンシャルに伴ったクーロン力を電子の位置の関数として評価した。さらに、有限サイズの電子に対するゲート電極-絶縁膜-Si 基盤の 3 層構造のもとでの自己鏡像ポテンシャルの解析解を求め、SCMC の結果と比較を行った。

【計算結果と考察】 自己鏡像ポテンシャルは、電子の離散（局所）性に伴って生じる。その結果、連続体近似のドリフト拡散シミュレーションなどではその影響は組み込まれない。一方、粒子シミュレーションでは電子の離散性が考慮されるが、電子の運動とともに自己鏡像ポテンシャルがダイナミカルに変動するため、ポテンシャルゆらぎを正確に再現するためのポアソン方程式との自己無撞着な結合が不可欠となる。加えて、ポアソン方程式は着目する電子も含めたすべての電子分布に対して解かれることから、SCMC では自己鏡像ポテンシャルの影響が組み込まれると考えられる（図 1）。図 2 に、2 通りの手法で SCMC から求めた界面近傍の電子に働く自己鏡像クーロン力を界面からの距離の関数として示す。SiO_2 の比誘電率が Si のそれよりも小さいことから、ゲート電極（金属）-SiO_2 絶縁膜構造で斥力の自己鏡像力が正しくシミュレートされていることがわかる。また、さまざまな電子サイズのもとでの自己鏡像クーロン力の解析解も同時に示す。シミュレーション結果は、電子サイズが 2, 3 nm の解の間にあることがわかる。この結果は、モンテカルロシミュレーションにおける電子広がり（遮蔽長程度：2~3 nm）と整合性が取れている。

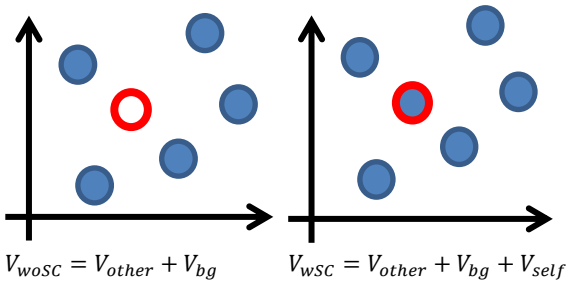

Fig.1. Schematic drawings of solving the Poisson equation without self-charge effect (left) and with self-charge effect (right).

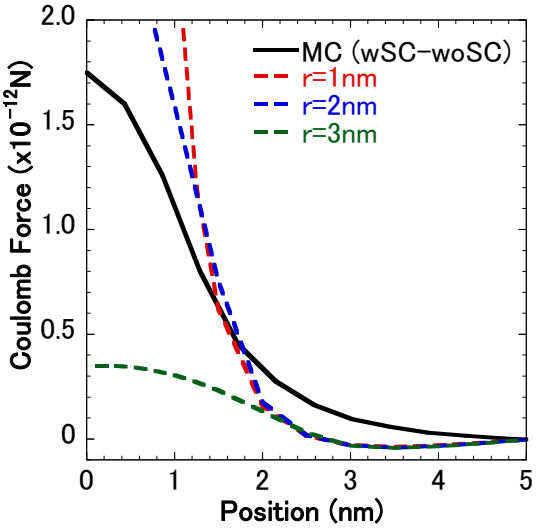

Fig.2. Self-image forces obtained from the self-consistent Monte Carlo simulation (solid line) and analytical results with various electron sizes under the three layers structure (dotted lines).

[1] M. Kleefstra, G.C. Herman, J. Appl. Phys. Vol.51, 4923 (1980); F Gámiz, et al., Microelectron. Eng. 72 , 374 (2004).

[2] 土屋、吉田、佐野、H26 年春季応用物理学会 (2014).

© 2014 年　応用物理学会