

ランダム行列フォノンモデルに基づく NEGF シミュレーション

NEGF simulation based on a random-matrix model of confined phonons

阪大工 美里劫 夏南, ○ 森 伸也

Osaka Univ. G. Mil'nikov and N. Mori

E-mail: {gena, mori}@si.eei.eng.osaka-u.ac.jp

ポストシリコンとなる次世代の新材料トランジスタの性能予測に向けたスーパーコンピュータ支援非平衡グリーン関数 (NEGF) 法デバイスシミュレータの実現のためには、高速並列計算手法の開発が重要である。弾道輸送の場合、ソース電極からデバイスに注入された電子は、エネルギーを変えることなくドレイン電極へと流れるため (電子状態がエネルギー毎に独立であるため)、NEGF 輸送方程式を解く際、エネルギー方向に分散させた並列化が効率的である。しかし、トランジスタの性能予測のためには、弾道輸送解析のみでは不十分であり、フォノン散乱などの非弾性散乱過程を導入した輸送計算における、効率的な並列計算手法の開発が望まれる。本研究では、ランダム行列フォノン (Random-Matrix Phonon, RMP) モデル [1] を用いることにより、フォノン散乱を考慮した NEGF 法において、エネルギー方向に分散させた並列化を実現した。

フォノン散乱の導入により、各エネルギー状態は独立でなくなる。このため、単純な並列化が困難となる。さらに、ナノワイヤ内では、フォノン閉じ込め効果により、連続的かつ複雑なフォノン分散となるため、並列化が一層困難になる。この連続的なフォノンスペクトルを、RMP では、等エネルギー間隔 Δ_{RMP} で、離散的な、少数個の無分散モードで近似する。これにより、エネルギー範囲 Δ_{RMP} 内の電子状態は、互いに交じることがないため、効率的な並列化が可能となる。

図 1 に、ゲート長 8 nm、直径 2 nm のシリコンナノワイヤトランジスタの伝達特性の計算結果を示す。実線はフォノン分散を厳密に取り扱った場合の結果、丸印は RMP 近似を用いた場合の結果である。計算は、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 を利用して行なった。図 2 に相対誤差を示す。計算した範囲では、相対誤差 5 % 以内の良好な一致を得た。本研究では、このシミュレータを用いて、界面付近における原子配置乱れがあるデバイスの電流電圧特性に、フォノン散乱が与える影響についても調べた。

[1] G. Mil'nikov and N. Mori, Proc. SISPAD 2014, pp. 317–320, 2014.

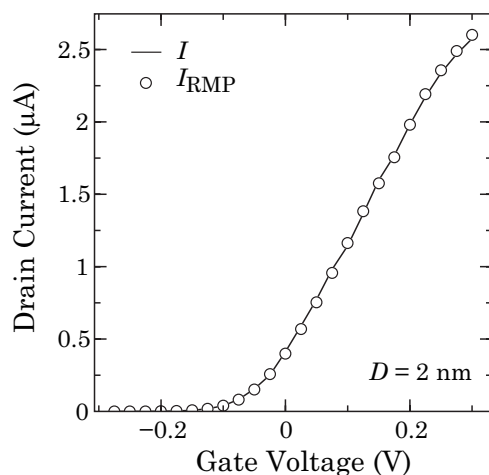


Fig. 1: Transfer characteristics calculated with the exact phonon modes (solid line) and those with the RMP modes (circle).

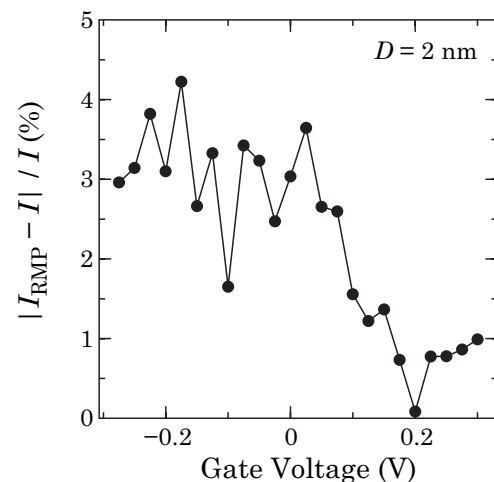


Fig. 2: Relative error, $|I_{\text{RMP}} - I|/I$, as a function of V_g . Here I (I_{RMP}) is the drain current calculated with the exact phonon (RMP) modes.