

# ナノスケールデバイスシミュレーションのための 非平衡グリーン関数法と障壁高さモデルの比較検討

## Comparative discussion of non-equilibrium Green's function method and

### "Top of the Barrier" model for nanoscale device simulation

神戸大院工 ○相馬 聡文, 岡 直左, 外田 祐也, 清水 良馬, 小川 真人

○Sاتفumi Souma, Naosuke Oka, Yuya Sotoda, Ryoma Shimizu, and Masato Ogawa

Department of Electrical and Electronic Engineering, Kobe University

新材料、新構造を用いた種々のナノスケール素子～電界効果型トランジスタ(FET)、受光素子、発光素子、熱電素子等～の設計をシミュレーションによる性能予測によって加速させるためには、微視的な詳細を考慮に入れたモデルと、様々なレベルで粗視化されたモデルの両方からのアプローチの併用、更にはそれらを統合させたマルチスケールの取り扱い重要である。ミクロなモデルからマクロなモデルへの階層には、材料の電子状態の記述に関する軸とその電子状態の占有に関するものがあるが、ここでは主に後者に焦点を当てる。例としてナノスケール FET のシミュレーションを考えると、非平衡グリーン関数法 (NEGF 法) やヴィグナー輸送方程式の手法を用いる事により、DIBL やソース・ドレイン直接トンネリング、各種散乱過程を考慮した上での性能予測が可能となるが、計算負荷の軽減や FET で起こっている物理の理解のためには、本質的に効いてくる部分のみを抽出したモデルとの比較が有用となる。そのようなフレームワークに、Top-of-Barrier (ToB モデル、障壁高さモデル) があり、これは、チャネル中のバルク的なバンド構造から決まる電子状態とゲート制御の静電気学をベースとする考え方である。

本講演では、ダブルゲート (DG) 型 MOSFET とゲートオールアラウンド (GAA) 型 FET (Fig. 1) を例とし、NEGF 法によって得られるデバイス特性と ToB モデルを用いて得られる特性を比較し、ToB モデル及びその拡張によって、NEGF 法による結果をどこまで再現できるかについて検討した結果を報告する。前者においては、NEGF 法による電荷密度計算とポアソン方程式を結合させ、得られたグリーン関数から電流を計算した。一方後者の ToB モデルにおいては、近似的な分布関数モデルによる電荷密度計算と、単純化されたポアソン方程式 (容量モデル) を結合させて解く事により、計算負荷の大幅な減少を実現した。前者においては量子トンネル電流が自然に考慮されるが、後者においては、ToB モデルに基づく電流に WKB 法を用いて得られるトンネル電流を付加的に考慮した。Fig. 2 に一例を示すように、ToB モデルにおいて短チャネル化によって起こる物理を適切に考慮に入れる事により、NEGF による結果と良好な一致を得ることが可能である。当日は、これらの詳細について述べると共に、スマート端末でのシミュレータ実装についての紹介も行う。

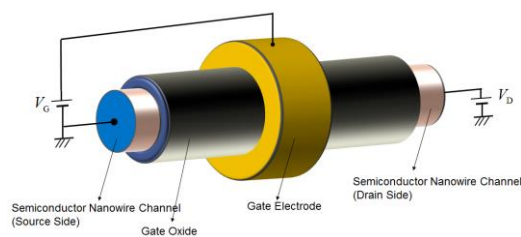


Fig. 1. Schematic illustration of cylindrical nanowire GAA FET.

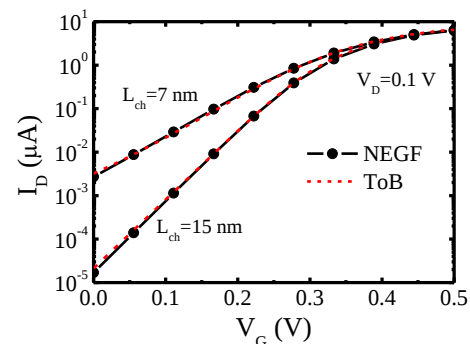


Fig. 1. Gate voltage dependence of drain current in cylindrical nanowire GAA FET with the radius  $R=1.2$  nm and the channel lengths:  $L_{ch}=15$  nm and  $L_{ch}=7$  nm under the ballistic condition. Results obtained from NEGF and ToB models are compared.