微細構造デバイスシミュレーションにおける局所的な乱れによるポテンシャルゆらぎの物理的側面

Physical Aspects of Potential Fluctuations associated with Localized Disorder in Device Simulations under Nanostructures

○ 佐野 伸行 [1] (1. 筑波大数理)
○Nobuyuki Sano[1] (1.Univ. Tsukuba)
E-mail: sano.nobuyuki.gw@u.tsukuba.ac.jp

スケーリング則に則った微細化メリットは，これまでの単純スケーリングの方向性とは異なるながらも，デバイス構造を立体化・複雑化することで引き続き追求され続けている．そして,「現実的な特性予測」において今も指導的役割を果たしているのはドリフト拡散法である．これは，デバイスの微細化に伴って，デバイスを取り囲む環境がデバイス特性に大きな影響を及ぼす傾向にあることに起因している．従って，信頼性の高いデバイス特性を得るためには，チャネルのみならずソース/ドレイン/ゲートまで含めたデバイス全域にわたるシミュレーションが不可避となる [1]. 加えて，ナノスケール領域で境界を有する微細構造の電子デバイスでは，不純物や欠陥，界面ラフネスなどの局所的な乱れがデバイス特性に本質的な影響を及ぼす．このようなデバイスの特性を決める最も重要な物理的要因は，従来の平面型デバイスと同様，デバイス基盤内のポテンシャル形状である．従って，いずれのシミュレーション手法を用いるにしても，正確な静電ポテンシャルを得ることが，デバイスシミュレーションの信頼性を高める必要（最低）条件となる．

しかしながら，不純物や界面ラフネス等の局在した乱れのポテンシャルへの影響をデバイスシミュレーションに導入するのは，ナノ構造のもとでは必ずしも容易ではない [2]. 例えば，キャリアや不純物のクーロンポテンシャルは二つの相反する過程でキャリアのダイナミクスに寄与する．一つは（熱運動ではなくて）ドリフト運動やプラズマ振動のような集団運動であり，もう一つは熱的ノイズの原因であるキャリア散乱である．不純物のような実空間で固定された電荷に対しては，前者はキャリアによる遮蔽効果によって影響を及ぼさない（とされている！）．一方，後者は，遮蔽から逃れたポテンシャルの短距離成分が散乱ポテンシャルとして作用する．これが輸送方程式の散乱項や移動度モデルに反映されている．その結果，輸送方程式と自己無撞着に結合したポアソン方程式では，長波長極限のポテンシャル成分（ゼロフーリエ成分）のみがポテンシャル形成に関与する枠組みとなっている．これは，不純物分布を連続体近似で表現することと等価であり，連続体近似のドリフト拡散法に離散不純物によるポテンシャルゆらぎを反映させることが自明ではなくなる．換言すれば，局在した乱れをデバイスシミュレーションに正確に反映させるためには，それぞれのシミュレーションの基本的枠組みのなかで想定されている長さのスケールと乱れの特性長との物理的整合性を考察することが必要となる．

本講演では，このような観点から，各種デバイスシミュレーションの理論的な枠組みのなかでの局在した不純物によるポテンシャルゆらぎの物理的側面について議論する．

[1] K. Nakanishi, T. Uechi and N. Sano, “Self-Consistent Monte Carlo Device Simulations under Nano-Scale Device Structures: Role of Coulomb interaction, Degeneracy, and Boundary Condition,” International Electron Devices Meeting (IEDM-2009), pp.79-82.
[2] N. Sano, “Physical Issues in Device Modeling: Length-Scale, Disorder, and Phase Interference,” International Conference on Simulation Semiconductor Processes and Devices (SISPAD2017), pp.1-4.

© 2018年 応用物理学会