

量子効果を考慮した半導体デバイスシミュレーション

Semiconductor Device Simulation with Quantum Mechanics

○ 森 伸也¹, 美里劫 夏南¹, 鍾 菁廣¹, 牧平 真太郎¹, 鎌倉 良成¹, 岩田 潤一², 押山 淳²

(1. 阪大院工, 2. 東大院工)

○ N. Mori¹, G. Mil'nikov¹, S. Sho¹, S. Makihira¹, Y. Kamakura¹, J. Iwata², A. Oshiyama²

(1. Osaka Univ., 2. Univ. of Tokyo)

E-mail: nobuya.mori@eei.eng.osaka-u.ac.jp

極限までデバイスの微細化が追求され, MOS トランジスタの物理的なゲート長はすでにキャリアの熱的なドブロイ波長程度に達している. 一方, 絶縁破壊電界が数 MV/cm と非常に高い, 広い禁止帯を持つ半導体を, パワーデバイスへ応用することが期待されている. これら, 極めて微細なトランジスタや, 非常に高い電界下の半導体におけるキャリア輸送には, 量子力学的な効果が重要な役割を演じる [1]. さらに, 近年, トンネル効果などの量子効果を積極的に利用したデバイスの開発も進められている. 以上のような背景のもと, 半導体デバイスシミュレーションに量子効果を導入する様々な試みがなされている. 本講演では, デバイスシミュレーションにおいて量子効果を考慮する手法のいくつかを概説した後, 現在, 我々が取り組んでいる研究の内容を紹介し, 量子輸送半導体デバイスシミュレーションの将来展望について述べる.

極微細トランジスタでは, 狭い空間にキャリアが閉じ込められることによる量子閉じ込め効果や, ソース・ドレイン間のポテンシャル障壁をキャリアが通り抜けるトンネル効果などの量子効果が重要な役割を演じる. 一方, 高電界下の半導体におけるキャリア輸送には, 散乱中にもキャリアが加速される, 散乱内電界効果や, 高エネルギー状態において散乱頻度が増すことにより, キャリアのエネルギー準位が幅を持つ, 衝突広がりなどの量子効果が無視できないと考えられている. これらの量子効果は, ドリフト拡散法などの半古典的な計算手法に, モデル項や補正項として導入されたり, 輸送方程式を量子力学的なものに置き換えることによりシミュレーションに導入される. 我々は, 現在, 量子力学的な輸送方程式を用いたデバイスシミュレータの開発を行っている. 図 1 に, 実空間密度汎関数理論 (RSDFT) [2, 3] と非平衡グリーン関数 (NEGF) 法とを用いて計算したナノワイヤトランジスタの伝達特性を示す [4]. 電子状態を RSDFT を用いて計算しており, 量子効果を考慮できるだけでなく, 有効質量や誘電率などの物質パラメータの入力が不要であり, 新しい材料を用いた極微細 MOS トランジスタのシミュレーションにも柔軟に対応できるという特徴を有している.

本研究の一部は, 文部科学省ポスト「京」重点課題 7「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」(CDMSI) の一環として実施した.

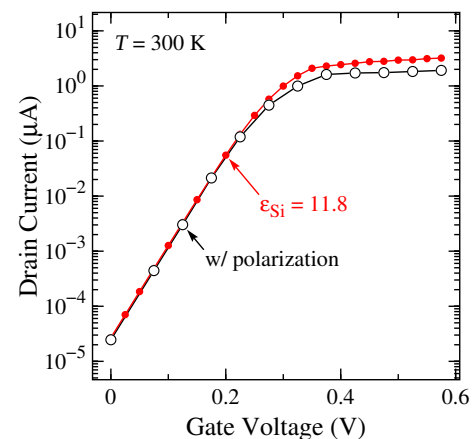


Fig. 1: IV characteristics of a Si NW MOS-FET with $L_G = 6$ nm and $D = 1$ nm. Open circles are obtained by directly computing the polarization charge. Closed circles are obtained assuming $\epsilon_{Si} = 11.9$ in the Poisson equation.

[1] “Quantum Transport in Semiconductors,” edited by D. K. Ferry and C. Jacoboni (Plenum Press, New York, 1992). [2] J.-I. Iwata *et al.*, J. Comput. Phys., **229**, 2339 (2010). [3] <https://github.com/j-iwata/RSDFT> [4] G. Mil'nikov *et al.*, Proc. SISPAD 2017, pp. 349-352 (2017).