

TCADシミュレーションにおける フォノンボルツマン方程式と熱伝導方程式間の境界条件の検討 Study on Interface Conditions between Phonon Boltzmann and Heat Equations in TCAD Simulation

○服部 淳一, 池上 努, 福田 浩一 (産総研)

○Junichi Hattori, Tsutomu Ikegami, and Koichi Fukuda (AIST)

E-mail: j.hattori@aist.go.jp

背景 半導体集積回路の適切な熱設計に向けては、熱を発すると同時にそれに影響されるトランジスタについて、熱にまつわる諸現象を理解することが一助になる。著者らは、半導体において熱の運搬を担うフォノンの見地から、トランジスタを含む電子デバイスにおける熱輸送をシミュレーションする方法、特に業界標準のシミュレータである TCAD 上で実現する方法を研究している [1]. フォノンによる熱輸送は運ばれるエネルギーに関するボルツマン方程式を解くことでシミュレーションできる。しかし、これには多くの計算資源を必要とするため、適用できるのはデバイスの一部の領域に限られる。したがって、残る領域では従来の熱伝導方程式に基づいて熱輸送をシミュレーションすることになり、境界において二つの方程式を整合させなくてはならない。Vallabhaneni らは、境界における温度や熱流の情報を交換しながら両者を交互に繰り返し解くことでそれを実現した [2]. しかし、TCAD に実装する場合、この方法は特別の手続きとして記述されることになる。そこで本稿では、境界条件によって二つの方程式の整合を図り、同時に解く方法を検討する。

方法 Fig. 1(a) に示すような厚さ $1\mu\text{m}$ の Si と SiO_2 の平板を重ねた構造を考え、Si 平板における熱輸送についてはフォノン・ボルツマン方程式、 SiO_2 平板については熱伝導方程式に従うとした。Si 平板におけるフォノンは単結晶におけるもので近似し、有限個のモードで代表した。それらのモードのうち Si/SiO₂ 界面において入射波に相当するモードによって界面に運ばれたエネルギーは、一部が SiO_2 平板に伝わり、残りは反射波に相当するモードによって Si 平板中に運ばれるとした。また、その反射モードによって SiO_2 平板から Si 平板に伝わるエネルギーも運ばれるとした。このようなエネルギーの授受を境界条件とし、方程式と合わせて Impulse TCAD [3] 上に実装して厚さ方向に温度差を設けた場合の温度分布をシミュレーションした。

結果 Si 側表面の温度を 400 K, SiO_2 側表面の温度を 300 K とした場合の厚さ方向の温度分布を Fig. 1(b) に示す。異種材料間の熱輸送では、界面において温度の飛びを生じることが知られているが、その再現に成功していることが分かる。

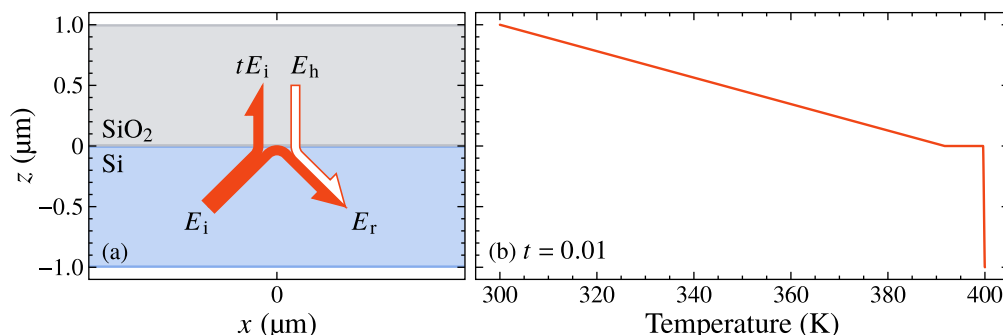


Fig. 1. (a) Schematic view of the considered Si/SiO₂ slab. The thermal energy flow at the Si/SiO₂ interface is also shown. (b) Temperature profile in the thickness direction.

- 参考文献** [1] J. Hattori *et al.*, Ext. Abstr. JSAP Autumn Meet., 2019, 18p-E303-10 [in Japanese].
[2] A. K. Vallabhaneni *et al.*, J. Heat Transf. **139**, 102701 (2017).
[3] T. Ikegami *et al.*, J. Comput. Electron. **18**, 534 (2019).