

デバイスシミュレーション-流体モデルとその発展的応用-

山口 憲* 富澤 一隆**

An Extension of Fluid-Dynamics Modeling used in Device Simulation

Ken Yamaguchi* and Kazutaka Tomizawa**

1. はじめに

半導体デバイスは60余年前の点接触トランジスタの動作に始まり、1970年代以降、集積回路(Integrated circuits)技術の発展により急速な進歩を遂げて来た。半導体デバイスの進展は固体物性理論と工学の融合の上に成り立った産業である。加えて、技術の進展と高度化を支えるにあたり第3の研究手法と言われる計算機シミュレーションが活躍した分野でもある。計算機が廉価で高速、大容量化し、且つパーソナル化した今日、計算機シミュレーションも日常的手法となってきた。本書ではデバイスシミュレーションの基礎から最近の応用までを述べてみたい。手法の主体は実用的流体モデルとし、超微細デバイスにおける準バリスティック伝導機構のモデリングや流体モデルと馴染みにくいトンネルモデリング等、流体モデルの限界を伸ばし、高度な設計ツールとする施策について考えたい。

2. デバイスシミュレーションの基本式

半導体産業における技術の向上は材料、プロセス、デバイス、回路、システムの各分野での弛みない進歩の賜物である。本書ではデバイス設計の為のシミュレーション技術にスポットをあてる。

デバイスシミュレーションは大別すると

1. 電子を荷電粒子とみなしニュートンの運動方程式に基づき追跡するモンテカルロ法シミュレーション(粒子モデル)と
2. 電子の集合とその運動を連続流体とみなしてボルツマン方程式に則りモデル化する流体モデル

* アドバンスソフト株式会社 コンサルティンググループ
Consulting Group, AdvanceSoft Corporation

** 明治大学 理工学部 情報科学科

Department of Computer Science, Meiji University

に2分化される。前者は電子のミクロな運動を追跡、解明することに有利であるが、計算時間が長く掛かる欠点がある。後者は電子をマクロな集合体と捉えデバイス動作の全体像を解明するのに有利であるが、電子のミクロな運動や分布状態を単独では準備できない。つまり、高度なシミュレーション技術を実用化するには2つの手法を相補的に活用することが賢いアプローチとなる。本書では実用性の観点から、緒言で述べた如く流体モデルを中心に実用的モデリングについて述べて行く。

2.1. ボルツマン方程式

電子の集団としての分布関数を f とするとき

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \frac{\mathbf{F}}{m} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} \quad (1)$$

と記載され、ボルツマン方程式と呼ばれる。ここに \mathbf{v} は速度ベクトル、 m は質量、 \mathbf{F} は外力である。

電子の運動はボルツマン方程式の第0次、1次、2次のモーメントから

- 1) 物質保存則 --- 電流連続の式 ---

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla(n\mathbf{v}) = G - R \quad (2)$$

- 2) 運動量保存則

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(m\mathbf{v}_d) + m\mathbf{v}_d \nabla(\mathbf{v}_d) + \frac{1}{n} \nabla(nk_B T) - \mathbf{F} \\ = - \frac{m\mathbf{v}_d}{\tau_m(w)} \end{aligned} \quad (3)$$

- 3) エネルギー保存則

$$\begin{aligned} \frac{\partial w}{\partial t} + \mathbf{v}_d \nabla w + \frac{1}{n} \nabla(n\mathbf{v}_d k_B T - \kappa \nabla T) + q\mathbf{v}_d \mathbf{E} \\ = - \frac{w - w_0}{\tau_w(w)} \end{aligned} \quad (4)$$

として記述される。

一方、外力 F は電場 E であり、電界はポアソン方程式の解である静電ポテンシャル Ψ より

$$\begin{aligned} E &= -\nabla\Psi \\ \nabla(\varepsilon\nabla\Psi) &= -\rho \end{aligned} \quad (5)$$

として与えられる。ここに ε は誘電率、 ρ は空間電荷密度を現す。

半導体内のキャリアは電子とプラスの電荷をもった正孔により構成される。正孔の運動方程式はその密度を p とするとき、電荷の符号が逆転していることを除けば、式(2)-(4)と同様な形式で与えられる。電荷の正負を考慮して空間電荷密度は

$$\rho = q(N_D - N_A - n + p) \quad (6)$$

で与えることができる。ここに q は素電荷、 N_D と N_A はドナー不純物、アクセプター不純物濃度である。式(2)-(6)ならびに正孔の運動方程式を自己無撞着に解くことにより半導体内部の電子・正孔の挙動を詳細に解明可能である。

2.2. 実用的アプローチ

定式化は既に述べたが、全ての方程式を数値解析することは非現実的である。特に運動量保存式は速度がベクトルであり、式(3)を展開すればテンソルとなる。ここで、式(3)の意味するところを考えてみる。まず、或る時間経過した後の平衡状態を考え、時間微分項を零とおく。また、速度の2次の項($v \cdot v = \frac{1}{2} v^2$)も小さいので、第1近似として無視する。外力 F は電場 E であるから式(3)は

$$\frac{1}{n} \nabla(nk_B T_e) + qE = -\frac{m_e v_d}{\tau_{me}(w)} \quad (7)$$

となる。これを速度ベクトル v_d について解けば

$$v_d = -\mu_n(w)E - \frac{D_n(w)}{n} \nabla n - \mu_n(w) \nabla \left(\frac{k_B T_e}{q} \right) \quad (8)$$

を得る。ここに、 $\mu_n(w)$ と $D_n(w)$ は電子エネルギー(w)の関数で表現される移動度と拡散係数で、

$$\mu_n(w) = \frac{q \tau_{me}(w)}{m_e} \quad (9)$$

$$D_n(w) = \frac{k_B T_e}{q} \mu(w) \quad (10)$$

で与えられる。式(9)、(10)を使って電子の流束ベク

トル J_n を表現すると

$$\begin{aligned} J_n &= -n v_d \\ &= \mu_n(w) n E + D_n(w) \nabla n + \mu_n(w) n \nabla \left(\frac{k_B T_e}{q} \right) \end{aligned} \quad (11)$$

となる。電子温度が格子温度と等しく且つほぼ一定とすると、式(10)の右辺第3項は消去され

$$J_n = \mu_n n E + D_n \nabla n \quad (12)$$

となる。式(12)はドリフト・拡散(DD)モデルと呼ばれる流体モデルである。DDモデルは電流密度を電界から直接算出可能と言う使い易いモデルであり、最も実用性の高いアプローチである。しかし、極短チャネルデバイスで起こる準バリスティック伝導(速度・電界関係における非局所性)のモデル化に不向きである。

これに対し、エネルギー保存則から求めた電子エネルギーを用い、速度を式(8)より算出する手立てを考えてみる。速度ベクトルの式を数値解析することにより圧倒的に計算時間を節約可能である。速度の2乗の項を無視できる範囲であれば、準バリスティック伝導に対しても実用的手段となる。このモデリングをエネルギー保存式に由来してエネルギーバランスの頭文字をとってEBモデルと名付けておく。但し、このモデルでは運動量ならびにエネルギー緩和係数を事前に求めておく必要がある。その為にはモンテカルロ法モデルが必要且つ有効である。本章序論で「2つの手法を相補的に活用」と述べた由縁である。

2.3. 緩和係数の算出

緩和係数を求めるにはモンテカルロ法モデルが必要となる。具体的には或る電界 E の中で1電子をニュートンの運動方程式に従って運動させる。但し、或る時間内で散乱、緩和プロセスを受けさせる。散乱から散乱までの時間、散乱・緩和の物理的プロセスの発生する確率を乱数により模擬する。電子が陰極から陽極まで到達したら、次の電子を陰極から放出し散乱・緩和の確率過程を繰り返させる。電子の飛行を数千回、数万回繰り返すことでマクロな緩和係数が見えてくる。運動量緩和係数は

$$r_m = \frac{1}{\tau_m} = \frac{qE \cdot v_d}{mv_d^2} \quad (13)$$

で与えられ、1 次元表記で

$$\frac{1}{\tau_m(w)} = \frac{qE}{mv_d} \quad (14)$$

となる。エネルギー緩和係数は

$$r_w(W) = \frac{1}{\tau_w} = \frac{qE \cdot v_d}{w - w_0} \quad (15)$$

となる。

3. 準バリスティック伝導の解析

3.1. シリコンにおける緩和係数

シリコン MOS 反転層に閉じ込められた擬 2 次元電子ガス(Two-Dimensional Electron Gas: 2DEG)の緩和係数をバルク中のそれと対比し、モンテカル口法により求めた例を図 3.1 と 3.2 に示す。図中、記号 (E_{\perp})で表示されている値が MOS 反転層の閉じ込め電界強度である。バルク中の電子(正孔)の緩和係数がエネルギー(w)と不純物濃度(N_I)の 2 変数関数

$$r_{\text{bulk}} = f(w, N_I) \quad (16)$$

となることに対し、MOS 反転層内の電子のそれは閉じ込め電界強度(E_{\perp})を加えた 3 変数関数

$$r_{\text{inv}} = f(w, E_{\perp}, N_I) \quad (17)$$

となることに注意を要する。

図 3.1 と 3.2 を見て特徴的なことは運動量・エネルギーいずれの緩和係数も低エネルギー側では反転層中の緩和係数がバルク中のそれよりも大きいことである。これは電子の散乱確率がエネルギーの状態密度の終状態に比例することによる。つまり、2 次元状態に量子化された電子の状態密度がバルク中(3 次元自由電子)の状態密度と大きく異なることに依存している。逆に、高エネルギー側ではバルク中の緩和係数が擬 2 次元電子ガスのそれよりも大きく、バルクの散乱機構が MOSFET を形成しても支配的になることを物語っている。

電子エネルギーの高低と MOSFET デバイス動作機構との関係を考えてみる。MOSFET の動作は強反転層が形成されても、図 3.3 に示される如く、ドレイン近辺では空間電荷制限電流と呼ばれるバルクの動作機構が存在する。反転層形成領域と空間電

荷制限電流が形成される領域の分離点が所謂ピンチオフ点である。

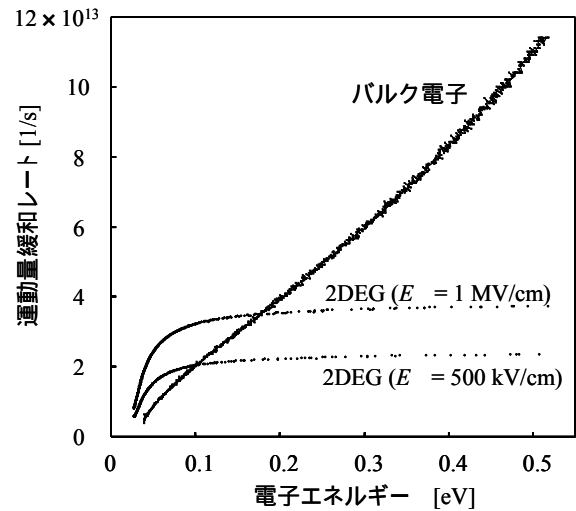


図3.1 シリコン中電子の運動量緩和レート

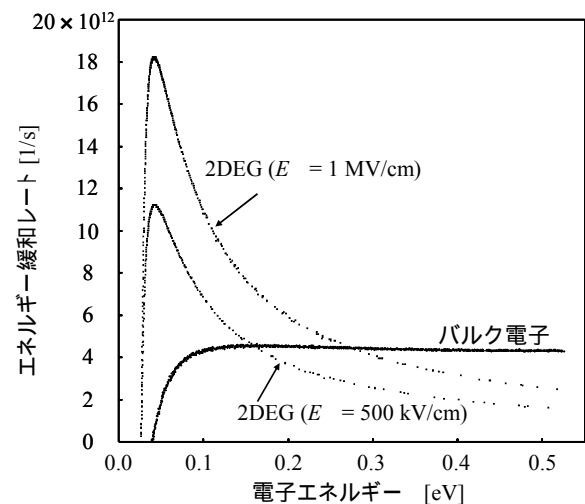


図3.2 シリコン中電子のエネルギー緩和レート

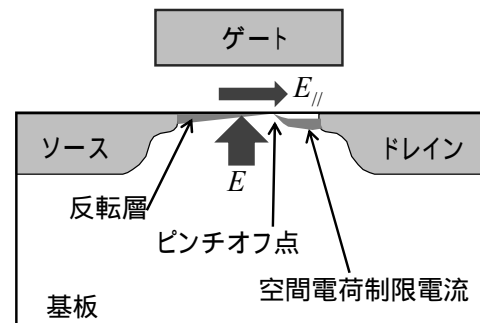


図3.3 MOSFETの断面構造図と動作機構

図 3.1 と 3.2 に現れた緩和係数のエネルギー依存性と図 3.3 に示すデバイス動作の相関を考えると次

のことが分かる。

1) 電子エネルギーが低く、MOS 反転層の緩和係数がバルク中のそれよりも大きいエネルギー領域はデバイス動作ではピンチオフ点よりソース側の反転層形成領域に該当する。

2) 電子エネルギーが高く、MOS 反転層の緩和係数がバルク中のそれよりも小さいエネルギー領域はデバイス動作ではピンチオフ点よりドレイン側の空間電荷制限領域の伝導に該当する。

上記 1)、2)の特徴を纏め、MOSFET デバイス内部全体に渡る緩和係数を表現すると

$$r = \max[f_{\text{inv}}(w, E_{\perp}, N_I), f_{\text{bulk}}(w, N_I)] \quad (18)$$

と言う包絡線関数を得ることができる。ピンチオフ点と言う概念はシミュレーション結果を見て定義できる結果情報であり、シミュレーションを行う時点で明確なものではない。従って、デバイス全体に渡って物理基本式を数値解析するシミュレーションを行うには、式(18)のような全体を見渡すことのできるモデル化が必要不可欠となる。式(18)による包絡線関数は 2 つの値の内、いずれか大きい方を採用すると言う単純なアルゴリズムであるので、大型のシミュレーションに便利なモデル化である。

3.2. 緩和係数の高精度・簡易モデル

電子(正孔)のエネルギー状態を知り、速度をエネルギーの関数として式(8)より求めるには、エネルギーと運動量の緩和係数を事前に求めておく必要がある。式(18)が包絡線関数と言う簡単な表式であっても、その中身は 3 次元関数となっている。モンテカルロ法を使って多次元データを作ることは非現実的である。そこで、何らかの現実的方策(簡易化)が必要となる。

散乱・緩和機構の物理現象を考えてみる。まず、不純物散乱は弾性散乱でエネルギーの散逸を伴わない。従って、エネルギー緩和の過程では不純物濃度依存性は消失する。式(18)で表現される緩和係数の内、エネルギー緩和係数(r_w)から不純物濃度の項(N_I)が消去され、

$$r_w = \max[f_{\text{inv}}(w, E_{\perp}), f_{\text{bulk}}(w)] \quad (19)$$

と 1 次元、簡略化される。

これに対し、バルク中の運動量緩和は不純物濃度に大きく依存する。但し、反転層内 2DEG の緩和レートは不純物濃度に依存するものの、大きさは小さい。従って、運動量緩和係数(r_m)も

$$r_m \approx \max[f_{\text{inv}}(w, E_{\perp}), f_{\text{bulk}}(w, N_I)] \quad (20)$$

と 2 次元データ構造になる。

式(19)、(20)いずれもデータ構造は 2 次元に簡素化される。それでも、緩和係数をモンテカルロ法で準備することは非現実的である。一方、図 3.1 と 3.2 を見て気付くことは、反転層内電子の緩和係数のエネルギー依存性は閉じ閉じ込め電界強度(E_{\perp})パラメータに対し相似形を成していることである。先に述べた如く、散乱の終状態が反転層内電子の状態密度に依存し、状態密度は主に閉じ込め電界により決定されるからである。そこで反転層内電子の緩和係数については、運動量・エネルギーいずれに関しても

$$f_{\text{inv}}(w, E_{\perp}) \approx g(E_{\perp}) \times h(w) \quad (21)$$

と近似可能になる[1]。

バルク中の電子の運動量緩和係数はエネルギーが低い領域では不純物散乱が強く作用し、結果、低電界移動度は不純物濃度に逆比例の関係を示す。一方、高電界中のホットな電子は不純物濃度に依存せず、速度飽和を示す。これはエネルギーの高低における支配的散乱機構が異なることと、両機構が独立事象であることに特徴[2]がある。この結果、バルク中の運動量緩和係数についても

$$f_{\text{bulk}}(w, N_I) \approx v(w) \times \lambda(v) \quad (22)$$

という 1 次元関数の集合による近似が可能となる[1]。式(21)と(22)のような 1 次元展開ができればモンテカルロ法を利用して精度の高い緩和係数を容易に取得可能となる。

3.3. 極微細 MOSFET の準バリスティック伝導解析

式(20)、(21)にて表現される緩和係数をモンテカルロ法で求め、2.2 節で述べた EM モデルによりバリスティック伝導を解析した例[1]を紹介する。まず、素子構造を図 3.4(a)に示す。ソースとドレインに extension 領域をもった LDD (Lightly Doped Drain) 構造である。

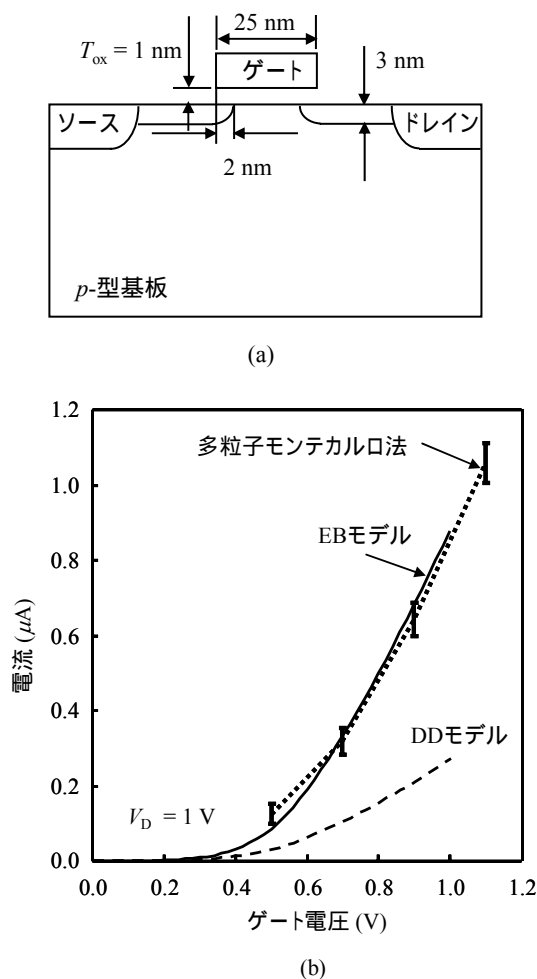


図 3.4 極微細 MOSFET の準バリスティック解析
(a) 構造図 (b) 電流 - 電圧特性 出典[1]

EB モデルで計算した電流 - 電圧特性を多粒子モンテカルロ法と比較したのが同図(b)である。連続流体 EB モデルによる解析結果は多粒子モンテカルロ法と良好な一致を見せており、EB モデルの妥当性を示していると言える。また、多粒子モンテカルロ法計算時間が長いことを考慮すると、EB モデルが実用的アプローチであることを理解できる。

4. トンネル効果のモデリング

4.1. 量子補正ポテンシャルの導入

トンネル効果は或る確率で壁を貫通する確率波の現象で、古典的流体モデルとは馴染まない。しかし、量子力学を用いて輸送問題を解くことは、特に構造をもった 2 次元、3 次元問題には実用性から離れてしまう。そこで、Feynman et al, [3] により導

入された量子ポテンシャルを導入する。新たに導入するポテンシャルを量子補正と呼ぶことにする。

量子補正の方法は次のように表現される。まず、垂直にそびえるポテンシャルの壁から電子が受ける量子力学的な反発力は、実効ポテンシャル

$$\tilde{\varphi}(x_0) = \left(\frac{\alpha}{\pi} \right)^{d/2} \int \varphi(x) \exp \left[-\alpha(x - x_0)^2 \right] dx \quad (23)$$

により表現される。ここに、 d は次元数、 α は電子温度の関数で、次式により与えられる。

$$\alpha = \frac{6m^* k_B T_e}{\hbar^2} \quad (24)$$

ここで Si/SiO₂ 界面を考えてみると、 $\varphi(x)$ は伝導帯の底を現わすポテンシャル、つまりステップ状の不連続性をもった関数である。これに対し、量子力学的実効ポテンシャルは式(23)のようにガウス関数を乗算して得ることができる。結果、ステップ関数的に変化していた伝導帯の底は滑らかな関数に変換されることになる。滑らかな関数表示は数値解析にも適したモデルである。

式(23)によるモデリングの解析例を Si/SiO₂ 界面にとって図 4.1 に示す。Si と SiO₂ の伝導帯の不連続量(ΔE_C)は約 3.1 eV ある。Feynman et al, [3] により導入された量子化補正ポテンシャルは図に見られる如くステップ状の変化を緩やかな変化に変換している。デバイスシミュレーションの立場からは収束性を改善するものであり、流体モデルと量子効果を繋ぐ有効なモデリングである。

4.2. ヘテロ界面への応用

Si/SiO₂ 界面だけでなく異なる材料が接触する境界面では、一般的にヘテロ構造となる。まずはじめにギャップ幅の広い材料がギャップの狭い材料に挟まれた場合を想定する。図 4.2 にバンド構造と量子補正されたポテンシャルを示す。電子濃度がワイドギャップ領域で連続的に減少していくことが分かる。このような構造に対し両側から電圧を印加した場合の電流 - 電圧特性を図 4.3 に示す。構造が対称なので、電流 - 電圧特性も正負対称である。しかし、電流 - 電圧特性が非線形な特性を示している。ヘテロ構造の導入に伴う非線形性の創生となって

いる。なお、電流の絶対値は移動度の値に依存する。ここでは一定の値を仮定して計算した例を示したものである。補正ポテンシャルの導入により、テロ界面を貫通する電流を容易に計算可能とさせた意義は大きい。

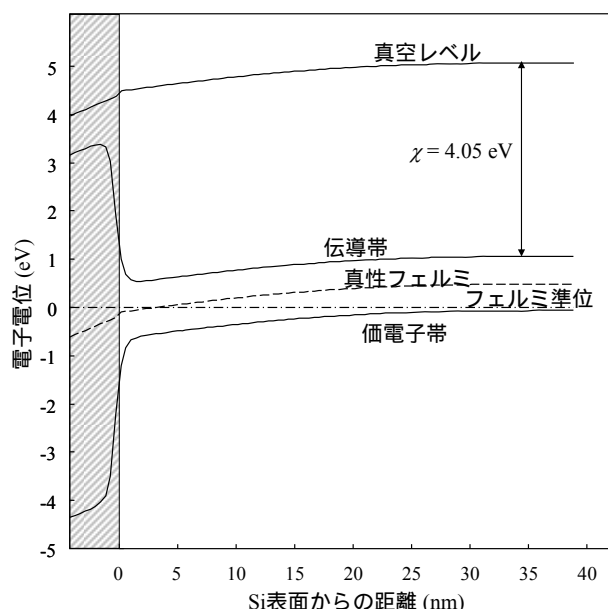


図 4.1 量子補正ポテンシャルの適用例

次に図 4.4(a)に示すような1段ヘテロ構造とヘテロ界面を通過する電流 - 電圧特性の解析結果を同図(b)に示す。ヘテロ界面を流れる電子流にとって右から左方向と、左から右方向でポテンシャル障壁の効果が異なり、結果、電流 - 電圧特性に非対称性が発生する。ここでは伝導帯の底の不連続量(ΔE_C)をパラメータとして電流 - 電圧特性を解析した。不連続量(ΔE_C)の増大に伴い、逆方向電流が流れ始めるしきい電圧が大きくなることが分かる。電流 - 電圧特性だけを見ていると、あたかもショットキー障壁ダイオードの順・逆方向電流と逆耐圧特性を見ているようで、興味深い結果である。

図 4.2 あるいは図 4.4(a)に示したヘテロ構造における障壁高さは特定の材料を仮定したのではなく、むしろ仮想値である。いかなる材料も何らかのバンド構造を有するから、ここで仮定したテロ構造は最も一般的な複数層材料構造と言える。電気的特性評価は最も簡易で非破壊の評価法である。もし非線形な電流 - 電圧特性が得られた場合、ヘテロ構造を想

定しバンド不連続量を逆推定してみることも材料特性を解明する上で有効な方法となるのではないだろうか。

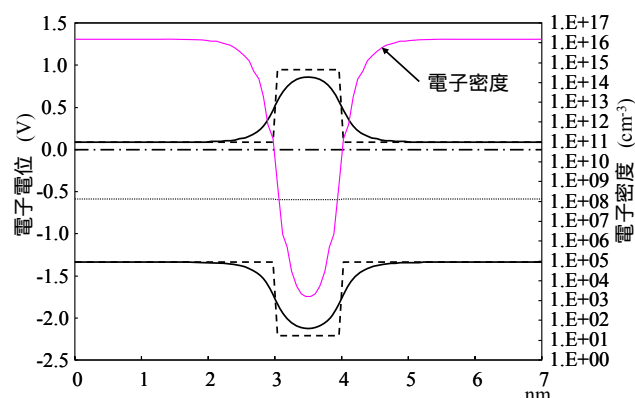


図 4.2 ワイドギャップ層を挟んだヘテロ構造

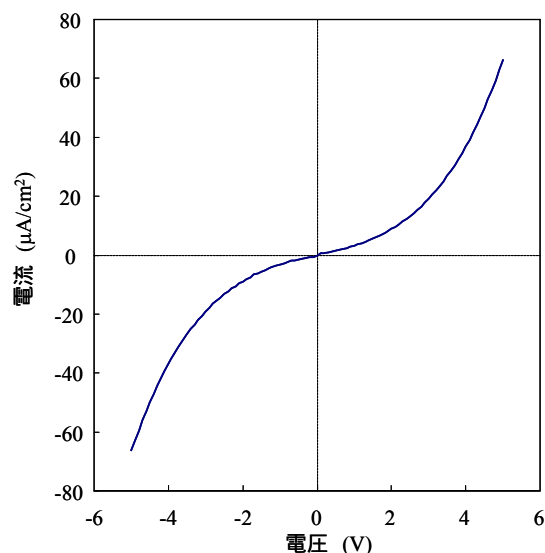


図 4.3 ヘテロ構造(図 4.2)の電流 - 電圧特性

5. まとめ

デバイスシミュレーションとは材料定数とデバイス構造を基に、電気的特性(電流 - 電圧特性)を解析する手段である。本書で流体モデルに基礎をおく古典的手法から出発して、超微細デバイスで顕著になる準バリスティック伝導に対する高精度簡易モデルと流体モデルとは馴染みにくいトンネル効果、量子効果のモデル化を述べて来た。古典的流体モデルが幅広く活用できるモデルであることを御理解頂ければ本書を準備した者として幸いである。

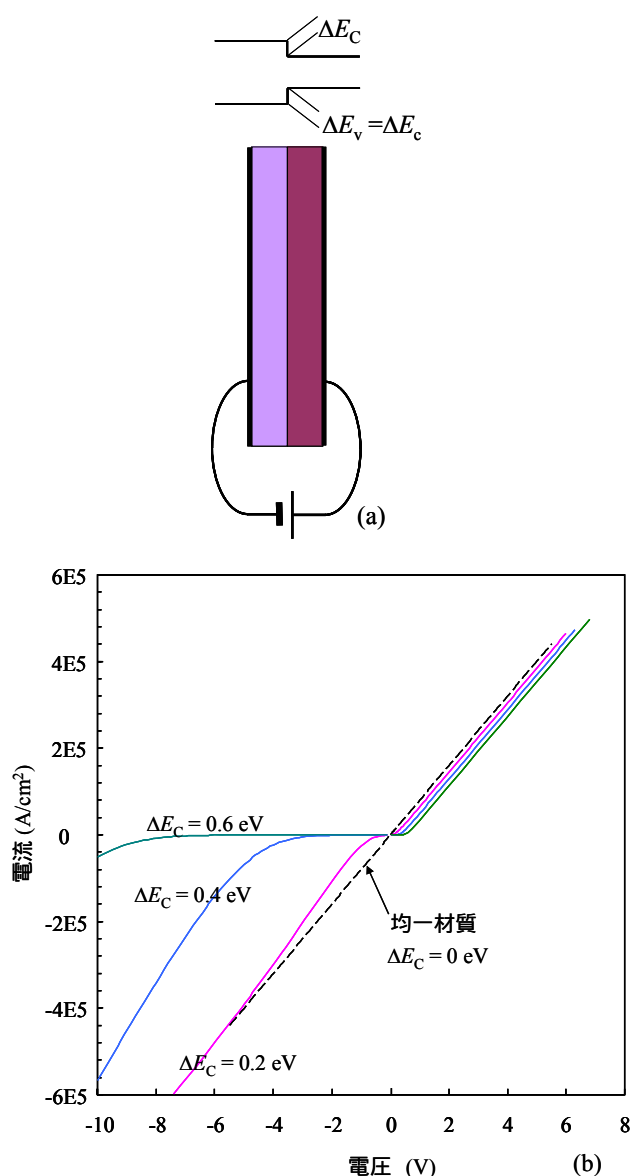


図 4.4 1 段ヘテロ構造(a)と電流 - 電圧特性(b)

6. 謝辞

第 3 章において紹介した準バリスティック伝導モデルは独立行政法人 科学技術振興機構 産学共同シーズイノベーション化事業 顕在化ステージの助成を受けて行われた研究成果を基に整理、加筆したものである。また、図 3.4 は参考文献[1]より引用し、手を加えたものである。独立行政法人 科学技術振興機構ならびに社団法人 応用物理学会に感謝します。

参考文献

- [1] K. Yamaguchi, S. Sakurai and K. Tomizawa, "An accurate and simplified modeling of

energy and momentum relaxation rates for metal-oxide- semiconductor device simulation", Japan. J. Appl. Phys., vol. 49, (2010) 024303

- [2] K. K.Thornber, "Relation of drift velocity to low- field mobility and high-field saturation velocity," J. Appl. phys., vol. 51, no. 4, pp. 2127-2136, Apr. 1980
- [3] R. P. Feynman and A. R. Hibbs, "Quantum Mechanics and Path Integrals", McGraw Hill, 1965