

アドバンス・シミュレーション 第4回 ・セミナー 2022

2022年10月14日(金) 離

プログラム

1. アドバンスソフト株式会社のご紹介 主催者あいさつ 1
- 招待講演
2. 「半導体デバイスシミュレーション技術の進展」 3
大阪大学大学院 工学研究科 電気電子情報通信工学専攻
教授 森 伸也 様
3. アドバンスソフトからの情報提供 45

講演概要

「半導体デバイスシミュレーション技術の進展」

大阪大学大学院 工学研究科 電気電子情報通信工学専攻
教授 森 伸也 様

次世代トランジスタ開発では、新しい材料や新しいデバイス構造の導入が検討されています。そのような多くの選択肢のなかから、最適なデバイス構造・チャンネル材料を見つけ出すためには、経験的なパラメータを必要としないデバイスシミュレーション環境の構築が望まれます。

本セミナーでは、半導体デバイスのモデリング・シミュレーションに関して、従来手法の原理や特徴などをはじめに概観します。そののち、次世代トランジスタ開発環境の構築に向けて研究が進められている手法などについて紹介します。



アドバンスソフト株式会社 セミナー事務局

〒101-0062 東京都千代田区神田駿河台四丁目3番地 新お茶の水ビルディング 17階西

TEL: 03-6826-3971 FAX: 03-5283-6580

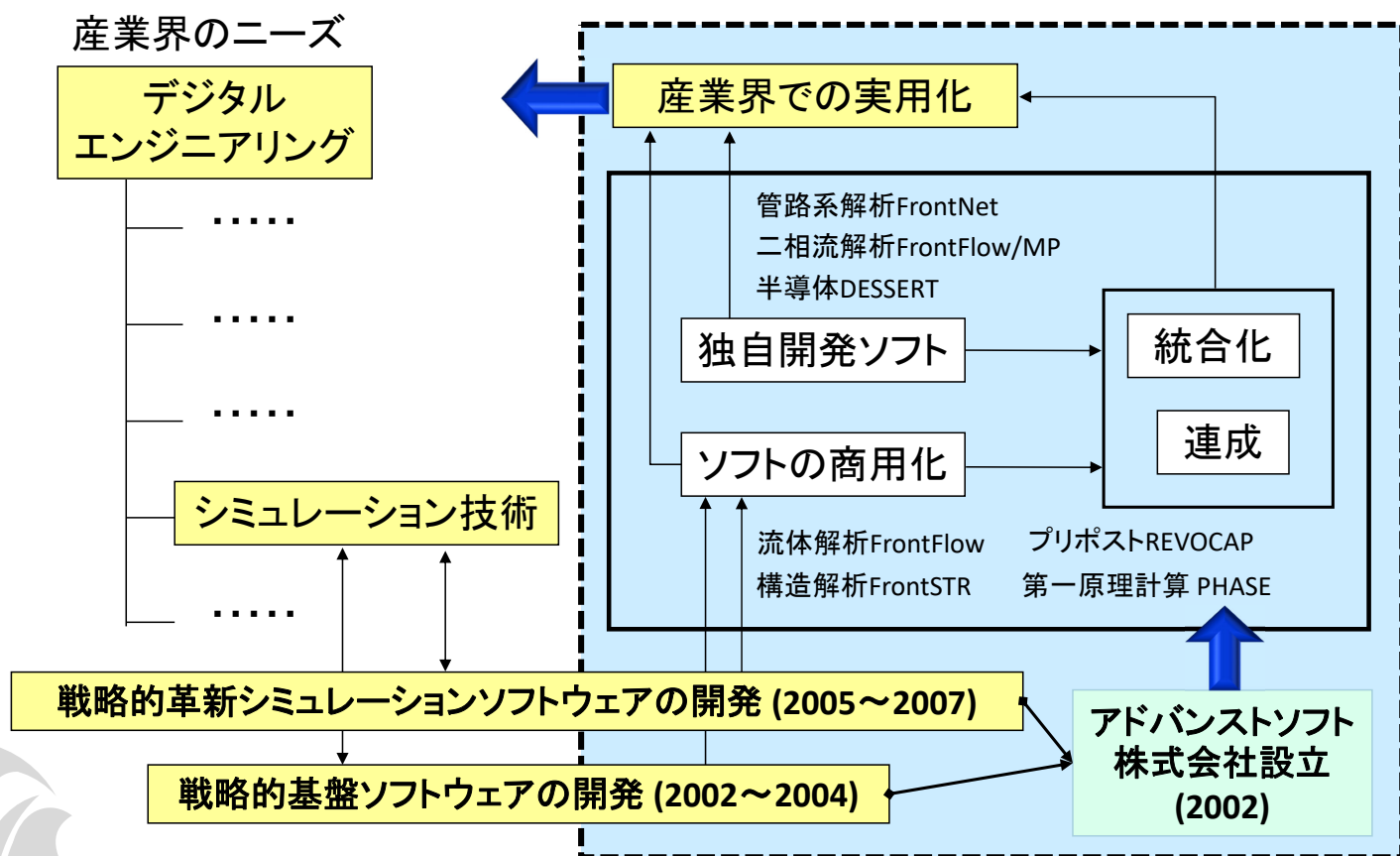
URL: <http://www.advancesoft.jp/> E-mail: office@advancesoft.jp

アドバンスソフト株式会社のご紹介

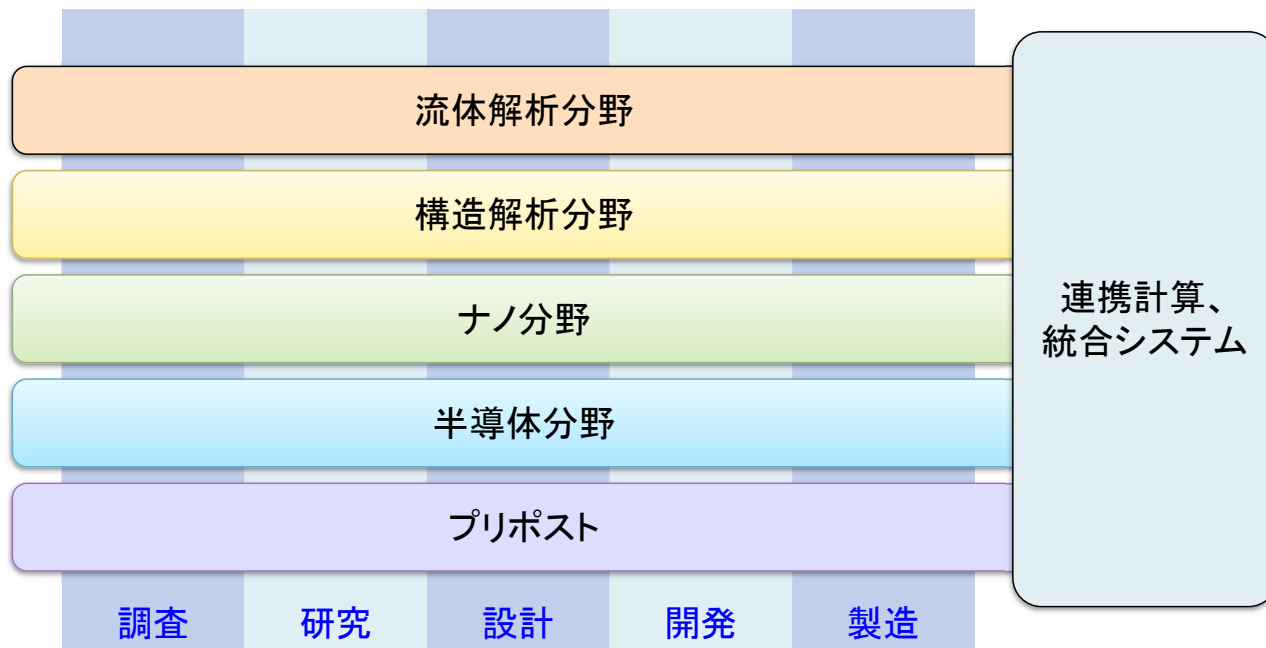
第4回 アドバンス・シミュレーション・セミナー
(大阪大学 森 伸也 教授 ご講演回)

2022年10月14日 (金) 開催
アドバンスソフト株式会社

アドバンスソフトとは



事業分野



産業の主要な分野のあらゆるフェーズで直面する課題に対し、科学技術計算によるソリューションをご提供します。

ソフトウェアご紹介

<p>第一原理計算ソフトウェア Advance/PHASE</p> <p>密度汎関数理論に基づき、物質の性質を原子・分子レベルから解析する第一原理計算ソフトウェアです。</p> <p>ナノ材料 GUI 付属</p>	<p>ナノ材料解析統合 GUI Advance/NanoLabo</p> <p>材料解析ソフトウェア QuantumESPRESSO と LAMMPS に対応した統合 GUI です。</p> <p>ナノ材料 プリポスト</p>	<p>流体解析ソフトウェア Advance/FrontFlow/red</p> <p>非圧縮性から圧縮性流れまで、広範囲で複雑な流れに対応した汎用 3次元流体解析ソフトウェアです。</p> <p>流体</p>	<p>圧縮性流体解析ソルバー Advance/FOCUS-i</p> <p>非構造格子に対応した圧縮性流体解析ソルバーです。特に超音速や超音速の流れに適しており、高い並列化効率で計算出来ます。</p> <p>流体</p>
<p>大規模 3次元 TCAD システム Advance/TCAD</p> <p>超微細半導体デバイスからパワーデバイスまで、高度な機能と使いやすい GUI を備えた 3次元 TCAD システムです。</p> <p>半導体デバイス GUI 付属</p>	<p>ニューラルネットワーク分子動力学システム Advance/NeuralMD</p> <p>Neural Network Potential に基づいた分子動力学のソフトウェアです。第一原理計算の結果を教師データとして分子力場を作成します。</p> <p>ナノ材料 AI・機械学習</p>	<p>気液二相解析ソフトウェア Advance/FrontFlow/MP</p> <p>沸騰と凝縮を伴う気液二相流の流動特性や伝熱特性を 3次元で解析するソフトウェアです。</p> <p>流体</p>	<p>管路系流体過渡解析ソフトウェア Advance/FrontNet</p> <p>配管や流体機器から成る管路系内流体に対する 1次元過渡解析の実用的なソフトウェアです。</p> <p>流体 GUI 付属</p>
<p>大規模電磁波解析ソフトウェア Advance/ParallelWave</p> <p>マクスウェル方程式を FDTD 法で 3次元的に解く電磁波解析ソフトウェアです。アンテナの電波解析から光の干渉や回折を考慮した光波解析まで幅広く適用できます。</p> <p>光波・電磁波</p>	<p>構造解析ソフトウェア Advance/FrontSTR</p> <p>固体の変形や熱伝導を、有限要素法を用いた 3次元で解析するソフトウェアです。</p> <p>構造</p>	<p>大気拡散影響予測システム Advance/Emerg</p> <p>大気拡散物質の挙動予測と影響評価のためのソフトウェアシステムです。</p> <p>流体 GUI 付属</p>	<p>深層学習用ツール Advance/iMacle</p> <p>機械学習のうち、ニューラルネットワークによる深層学習に特化、最小限度の機能に絞り込んだ比較的軽いツールです。</p> <p>AI・機械学習</p>
<p>汎用プリポストプロセッサ Advance/REVOCAP</p> <p>解析の一連の流れをスムーズに行う事を実現した汎用プリポストプロセッサです。</p> <p>プリポスト</p>	<p>音響解析ソフトウェア Advance/FrontNoise</p> <p>環境騒音、機器内の共振等における音場を有限要素法を用いた 3次元で解析するソフトウェアです。</p> <p>音響</p>	<p>自社による開発（国プロ含む） 開発チームによる質の高いサポートサービス カスタマイズや機能追加も応相談 並列数無制限（追加料金なし）</p>	

半導体デバイスシミュレーション技術の進展

森 伸也

大阪大学大学院工学研究科



大阪大学
OSAKA UNIVERSITY

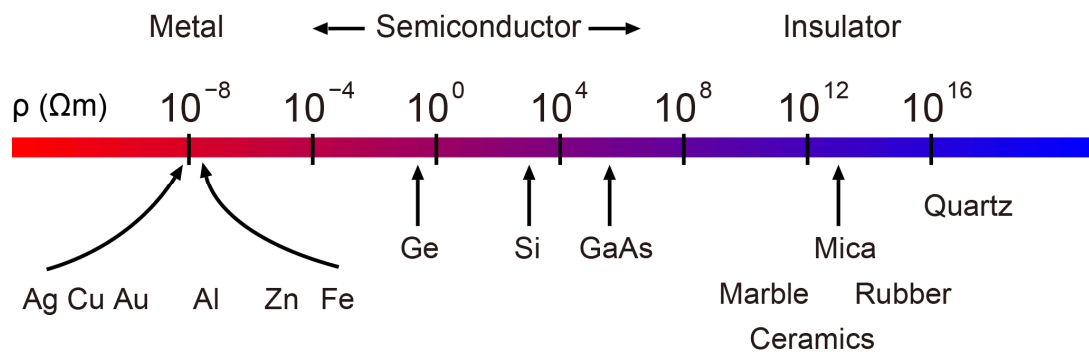
共同研究者：美里劫 夏南，田中 一，岡田 丈（大阪大学），岩田 潤一（Quemix），押山 淳（名古屋大学）
浅井 栄大，服部 淳一，福田 浩一（産業技術総合研究所）

あらまし

- 半導体デバイスシミュレーション
- ドリフト拡散シミュレーション
- モンテカルロシミュレーション
- 量子論デバイスシミュレーション
- 非平衡グリーン関数法
- 高速化計算手法
- 最近の話題
- ま と め

半 導 体

- シリコン, ゲルマニウム, 化合物半導体, 2次元物質, ...
- 不純物ドーピング, 電界, 光照射などによりキャリア密度を制御可能
- キャリア: 電子 (負電荷, n型), 正孔 (正電荷, p型)



2

半導体デバイス

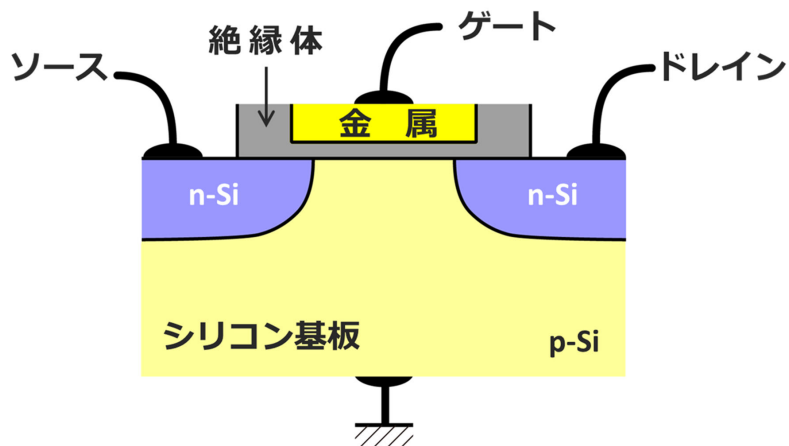
- ダイオード
- 小信号トランジスタ
- パワートランジスタ
- 整流素子
- サイリスタ
- 光エレクトロニクス
- センサー・アクチュエータ
- 集積回路

世界半導体市場統計 (WSTS) による分類
https://www.semiconductors.org/wp-content/uploads/2018/07/Product_Classification_2018.pdf

3

小信号トランジスタ

- バイポーラトランジスタ
- 電界効果トランジスタ (FET)
- 高周波トランジスタ



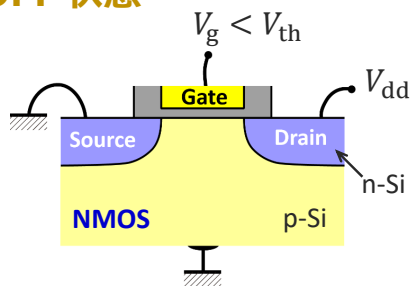
Metal-Oxide-Semiconductor Field Effect Transistor (MOSFET)

世界半導体市場統計 (WSTS) による分類

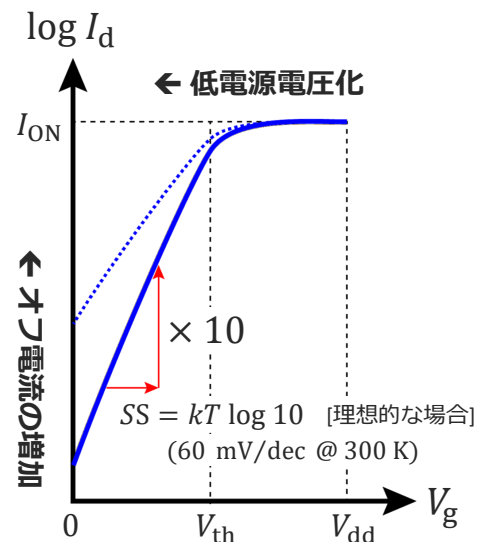
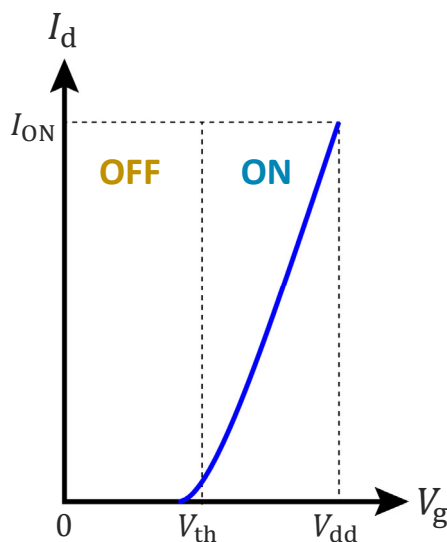
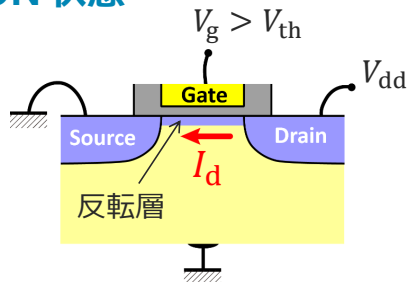
https://www.semiconductors.org/wp-content/uploads/2018/07/Product_Classification_2018.pdf

MOSトランジスタの伝達特性

OFF 状態

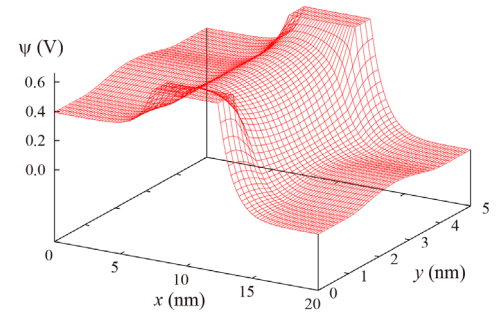
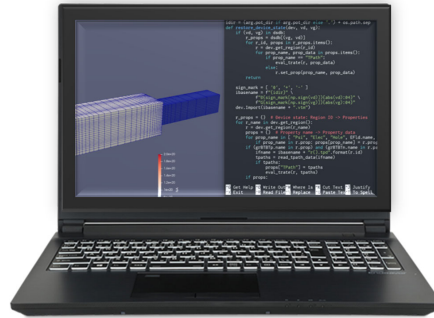
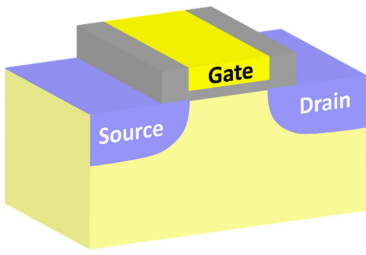


ON 状態



SS: Subthreshold Slope

デバイスシミュレータ



デバイス構造
不純物分布
バイアス条件
⋮

デバイスシミュレータ

グローバルな物理量

・電流電圧特性 など

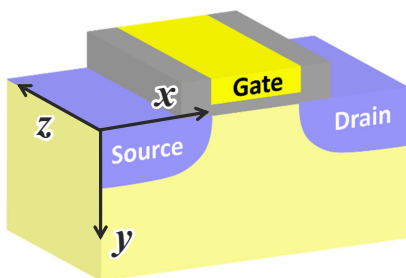
デバイス内部の物理量

・キャリア分布 など

6

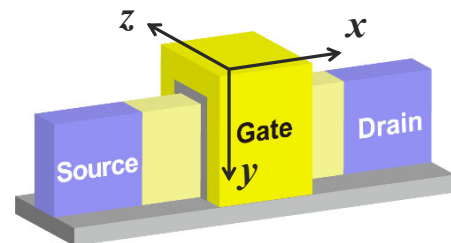
シミュレーションの次元

2次元シミュレーション



ゲート幅方向 (z 方向) に一様と仮定して、
2次元空間 (xy 空間) で方程式を解く

3次元シミュレーション



3次元空間 (xyz 空間) で方程式を解く

7

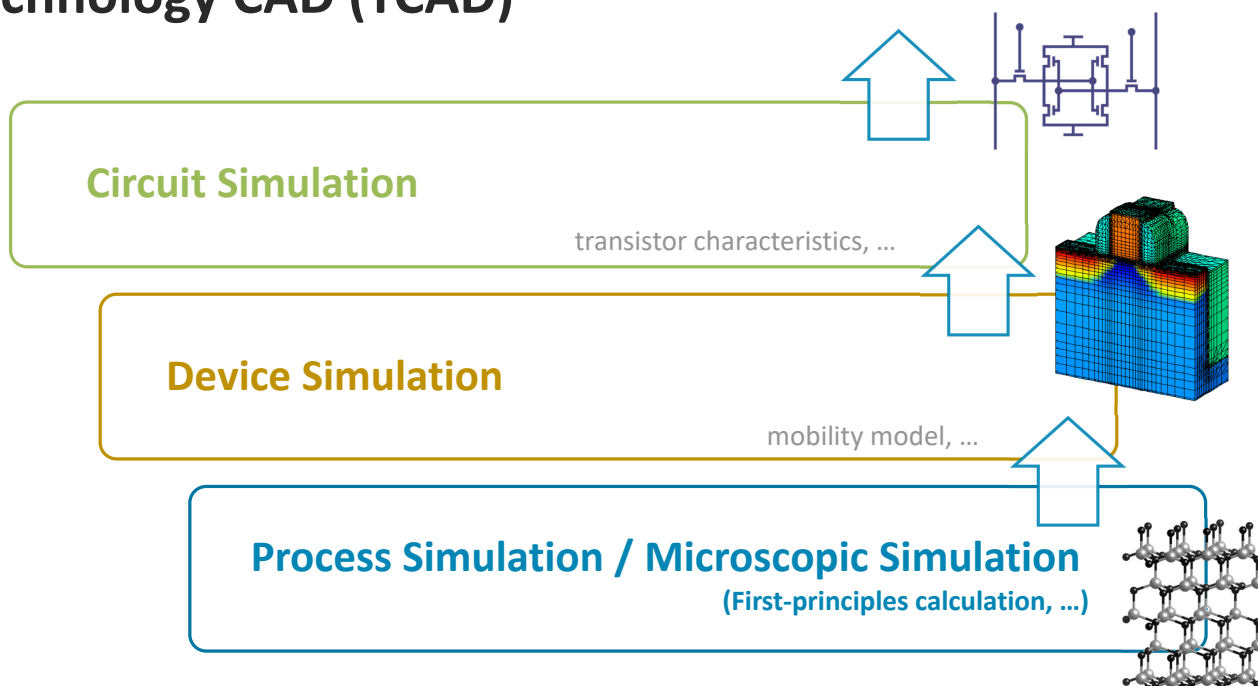
デバイスシミュレータ利用のメリット

- 半導体デバイス開発期間の短縮
- 半導体デバイス動作の理解
- 新しいデバイスの性能予測

C.M. スノーデン, 半導体デバイスのモデリング (浜口・谷口訳, 現代工学社)

8

Technology CAD (TCAD)



9

デバイスシミュレータ

- Synopsys, Sentaurus Device
- Silvaco, Victory Device, Atlas
- AdvanceSoft, Advance/TCAD
- AIST, Impulse TCAD
- HyENEXSS

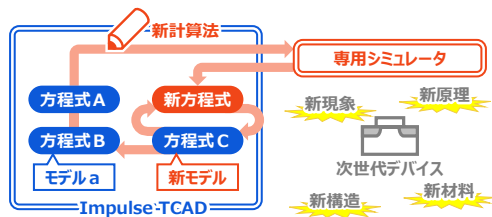
10

Impulse TCAD

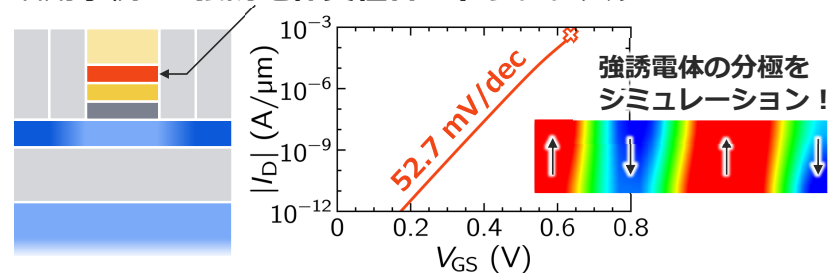
産総研が開発する次世代TCAD^[1]

新しい構造, 材料, 現象, 原理を利用する次世代デバイスの自在なシミュレーションを可能に

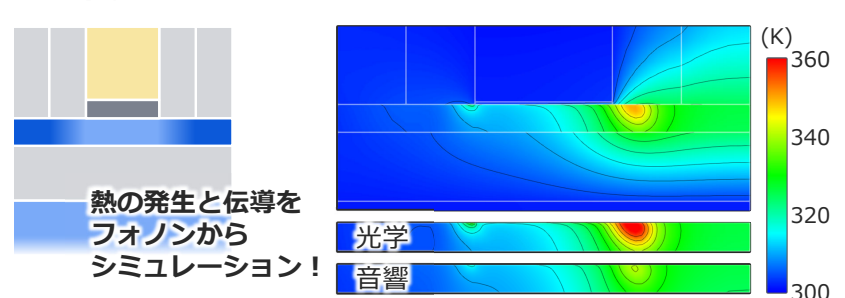
新しいモデルや方程式の追加,
シミュレーション手順の制御,
外部のシミュレータとの連携が簡単!



活用事例1 : 強誘電体負性容量トランジスタ^[2]



活用事例2 : フォノン熱輸送^[3]



[1] T. Ikegami et al.: J. Comput. Electron. **18**, 534 (2018). [2] J. Hattori et al.: Proc. SISPAD, 2018, 214.
[3] J. Hattori et al.: Jpn. J. Appl. Phys. **60**, SBBA03 (2021).

11

歴史

- 1952年 Shockley, 単極性FETの1次元解析 [1]
- 1966年 黒沢, Geのキャリア輸送のMC計算 [2]
- 1969年 Scharfetter-Gummel スキーム [3]
- 1973年 Kennedy & O'Brien, JFETの2次元シミュレーション [4]
- 1981年 Shichijo & Hess, フルバンドMCシミュレーション [5]
- 1982年 吉井ら, 3次元シミュレーション [6]
- 1984年 Silvaco設立 [7]
- 1990年頃 IBM, DAMOCLES [8]
- 2001年 Renら, DG-MOSFETのNEGFシミュレーション [9]
- 2017年 SynopsysがQuantumWiseを買収 [10]

青色：ドリフト拡散

黄色：モンテカルロ

緑色：量子輸送

[1] W. Shockley, Proc. IRE 1365 (1952). [2] T. Kurosawa, J. Phys. Soc. Jpn. Suppl. **21**, 424 (1966). [3] D.L. Scharfetter and H.K. Gummel, IEEE TED **16**, 64 (1969). [4] D.P. Kennedy and R.R. O'Brien, Electron. Lett. **7**, 714 (1973). [5] H. Shichijo and K. Hess, Phys. Rev. B **23**, 4197 (1981). [6] A. Yoshii, H. Kitazawa, M. Tomizawa, S. Horiguchi, and T. Sudo, IEEE TED **29**, 184 (1982). [7] en.wikipedia.org/wiki/Silvaco [8] S.E. Laux, M.V. Fischetti, and D.J. Frank, IBM J. Res. Develop. **34**, 466 (1990). [9] Z. Ren, R. Venugopal, S. Datta, and M. Lundstrom, IEDM 2001. [10] en.wikipedia.org/wiki/Atomistix_ToolKit

12

図書・雑誌・国際会議

- ・ 檀編著「プロセス・デバイス・シミュレーション技術」産業図書
- ・ 浜口・谷口訳「半導体デバイスのモデリング」現代工学社
- ・ 富澤著「半導体デバイスシミュレーション」コロナ社
- ・ 山口・富澤著「非平衡電子輸送理論」アドバンスソフト出版事業部
- ・ IEEE Transactions on Electron Devices
(<https://ieeexplore.ieee.org/xpl/RecentIssue.jsp?punumber=16>)
- ・ Journal of Applied Physics (<https://aip.scitation.org/journal/jap>)
- ・ Journal of Computational Electronics (<https://www.springer.com/journal/10825>)
- ・ SISPAD (<https://www.sispad.info/home>) – 工学寄り
- ・ IWCN (<https://www.iwcn.info/home>) – 物理寄り
- ・ IEDM (<https://www.ieee-iedm.org/>) – 電子デバイス

13

ドリフト拡散シミュレーション

14

The screenshot shows the Silvaco website for the Victory Device simulation. The header is red with the Silvaco logo and navigation links for products, IP, solutions, services, support, and company information. The main banner features a 3D visualization of a device structure with green and blue regions. Below the banner is a list of features and benefits, with a blue box highlighting two key points.

English | 日本語 | 한국어 | 简体中文 | お問い合わせ

SILVACO 製品 IP ソリューション サービス サポート 会社情報

Victory Device

- 汎用2D/3Dデバイス・シミュレータ、ドリフト拡散方程式、エネルギー・バランス輸送方程式
- DC、AC、およびトランジェント解析
- 正確な3Dジオメトリ表現のための四面体メッシュ。Delaunay メッシュのためのポロノイ離散化
- シリコンおよび化合物材料のユーザ・カスタマイズ可能な材料データベースを備えた高度な物理モデル

- ✓ 複雑な物理を捉え、現実的なデバイス構造を扱うための半経験的モデルの導入が容易
- ✓ 今日の開発現場が求めるターンアラウンドタイムを実現

- Atlasとの互換性

<https://silvaco.com/ja/tcad/victory-device-3d/>

15

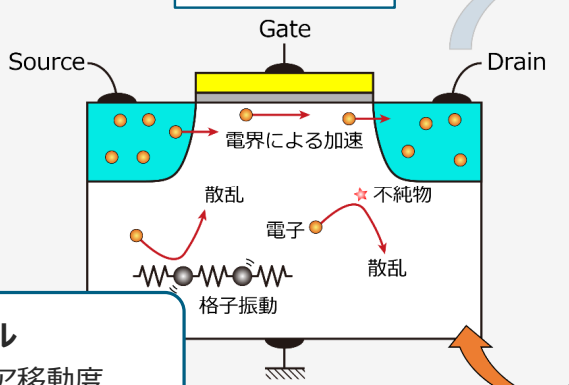
素子形状, 不純物分布
バイアス条件

トランジスタ特性

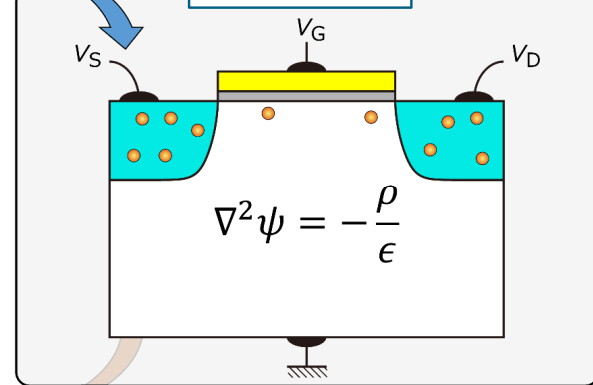
デバイスシミュレータ

キャリア密度分布
 $\rho(x)$

輸送方程式



ポアソンの式



物理モデル

- ・キャリア移動度
- ・生成・再結合割合
- ・...

ポテンシャル分布
 $\psi(x)$

16

輸送方程式

・ 古典論

- ボルツマン輸送方程式
 - ・ドリフト拡散, エネルギー輸送
 - ・モンテカルロ法

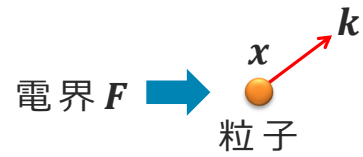
・ 量子論

- 非平衡グリーン関数法 (NEGF法)
- ウィグナー関数法
 - ・量子流体モデル
 - ・ウィグナー・モンテカルロ法

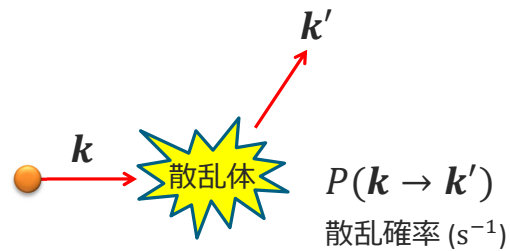
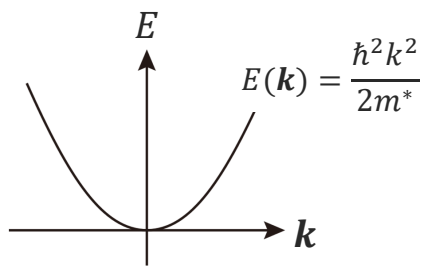
17

古典論の枠組み

- キャリアを古典的な粒子として扱う
 - 位置 x , 波数 k (速度 $v = \hbar k / m^*$)
 - 運動方程式 $\frac{dk}{dt} = -\frac{eF}{\hbar}$ ($m^* \frac{dv}{dt} = -eF$)



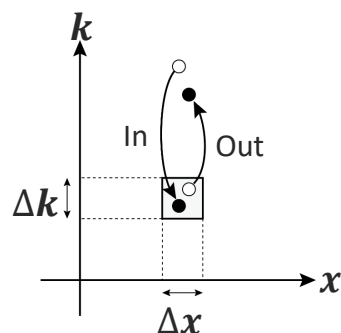
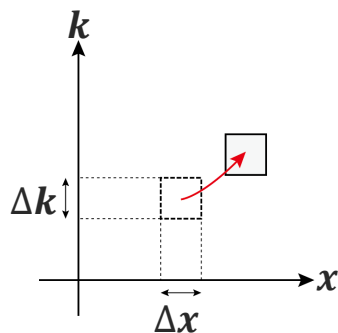
- キャリア分布を一粒子分布関数 $f(k, x, t)$ で記述
- バンド構造, 散乱確率は量子論の結果を利用



ボルツマン輸送方程式

- 分布関数 $f(k, x, t)$ に関する積分微分方程式

$$\frac{\partial f}{\partial t} - \frac{eF}{\hbar} \cdot \frac{\partial f}{\partial k} + v \cdot \frac{\partial f}{\partial x} = \frac{\partial f}{\partial t} \Big|_{\text{scat}}$$



$$\frac{\partial f}{\partial t} \Big|_{\text{scat}} = \sum_{k'} f(k') [1 - f(k)] P(k' \rightarrow k) - \sum_{k'} f(k) [1 - f(k')] P(k \rightarrow k')$$

In-scattering
Out-scattering

ボルツマン輸送方程式の解法

- **モーメント法**

- ドリフト拡散, エネルギー輸送, ...

- **直交基底展開法**

- 球面調和関数展開, ...

- **粒子法**

- モンテカルロ, セルオートマトン, ...

ドリフト拡散方程式

- ボルツマン輸送方程式の両辺に k^N をかけて積分 (モーメント法)

$$\frac{\partial f}{\partial t} - \frac{e\mathbf{F}}{\hbar} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{k}} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} = \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{\text{scat}}$$

- 0次のモーメントの式

$$\frac{\partial n}{\partial t} - \frac{1}{e} \nabla \cdot \mathbf{J} = 0 \quad (\text{連続の式})$$

- 1次のモーメントの式 (電子系の温度が格子温度に等しいと仮定)

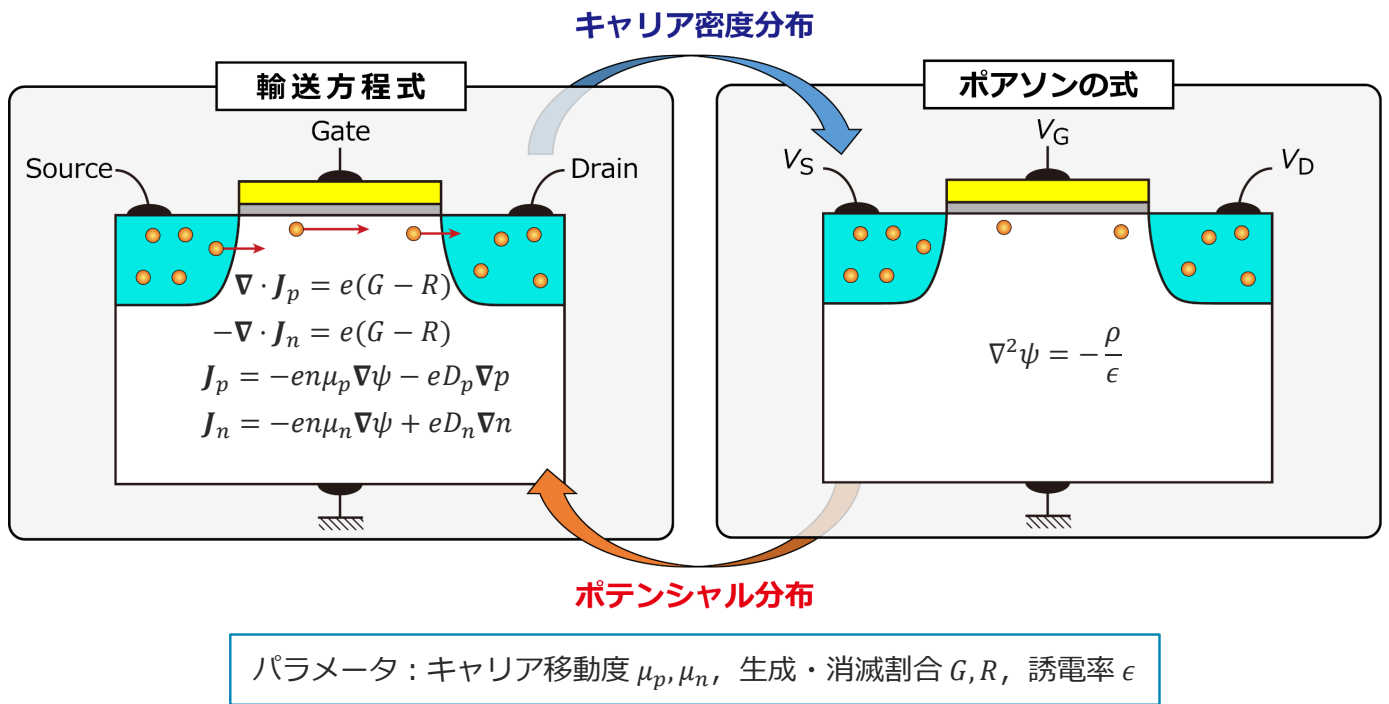
$$\mathbf{J} = en\mu\mathbf{F} + eD\nabla n$$

(ドリフト項) (拡散項)

- ドリフト拡散方程式 (定常状態)

$$\begin{cases} -\frac{1}{e} \nabla \cdot \mathbf{J} = G - R & (G, R: \text{生成} \cdot \text{消滅割合}) \\ \mathbf{J} = -en\mu\nabla\psi + eD\nabla n & (D = \mu kT/e) \end{cases}$$

ドリフト拡散シミュレータ



22

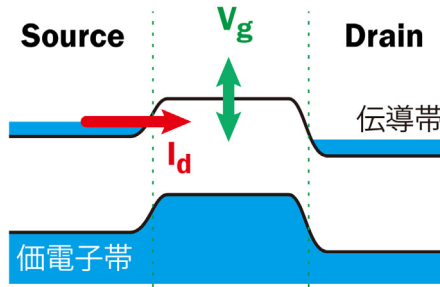
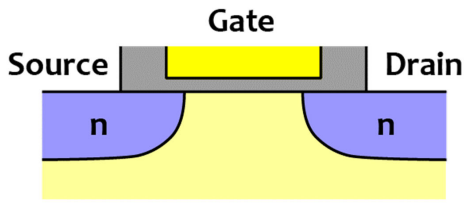
数値計算手法

- 変数の決定と規格化
 - $\psi(x), n(x), p(x)$
- 方程式の線形化
 - 非線形方程式の解を、Newton法などを用いて逐次近似で求める
- 方程式の離散化
 - 有限差分法, 有限要素法, 有限体積法
 - 行列演算

23

トンネルトランジスタ

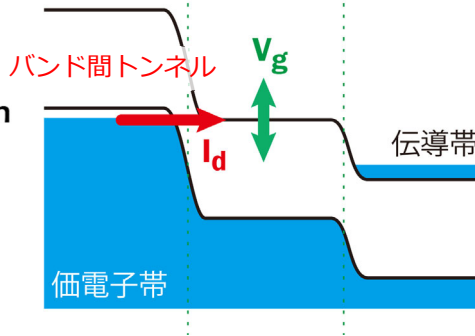
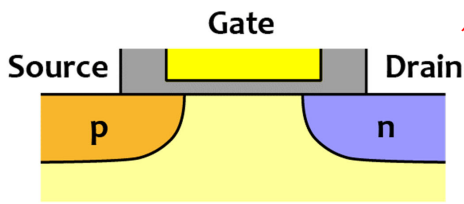
• MOSFET



ON/OFFの切り替えはボルツマン分布の裾で決まる

$$SS \geq kT \log 10$$

• TFET (Tunnel FET)

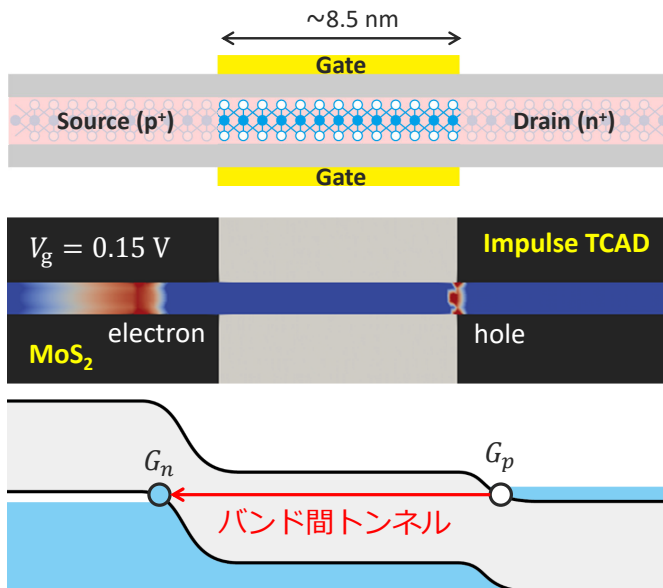


ON/OFFの切り替えはバンド端で決まる

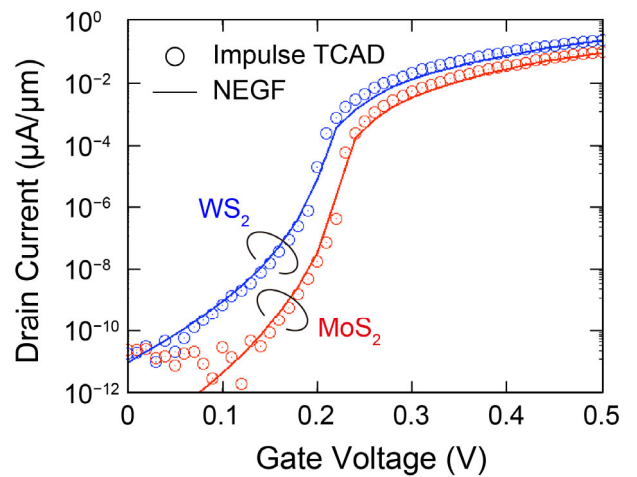
$$SS > 0$$

バンド間トンネル

2次元物質トンネルトランジスタ



バンド間トンネルをキャリア生成項 G でモデル化

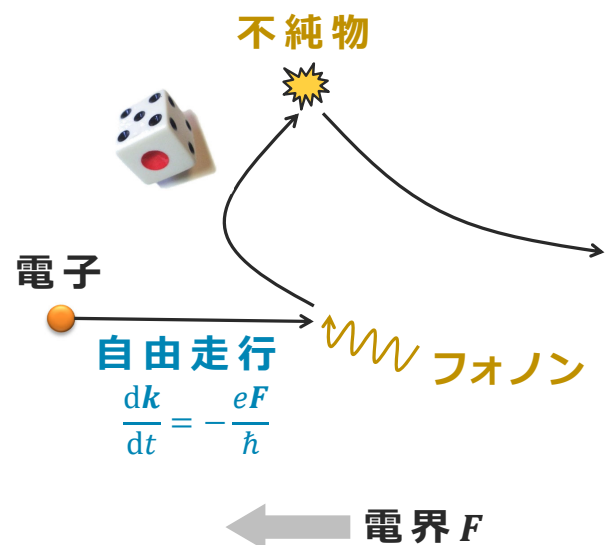
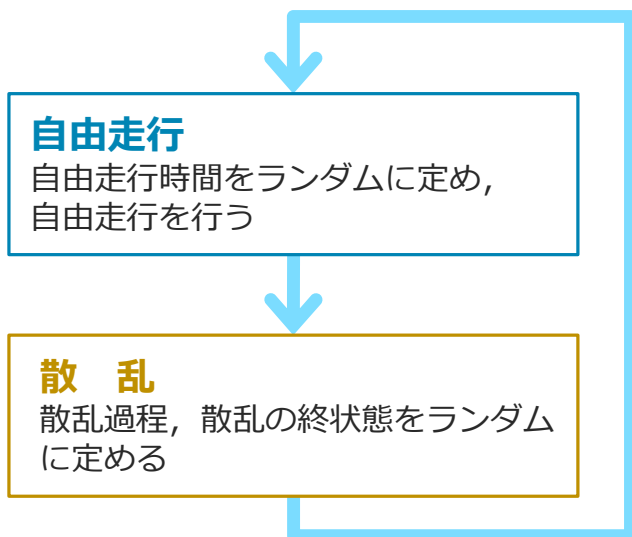


H. Asai et al., SISPAD 2020

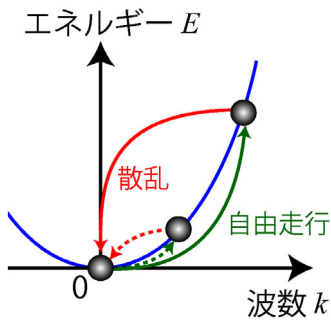
モンテカルロシミュレーション

モンテカルロ法

半導体中のキャリアの運動を直接模擬することによりボルツマン輸送方程式の解を得る方法



江崎モデル

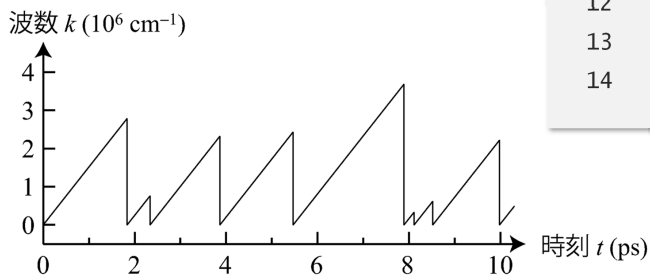


L. Esaki and R. Tsu, IBM J. Res. Develop. **14**, 61 (1970)

```

1 import numpy as np
2 from scipy.constants import e, hbar
3
4 tmax = 10e-12 # simulation time (s)
5 tau0 = 1e-12 # relaxation time (s)
6 F = 1e5 # electric field (V/m)
7 t = k = 0
8 while t < tmax:
9     # free flight
10    tf = -tau0 * np.log(np.random.rand())
11    t += tf
12    k += e * F / hbar * tf
13    # scattering
14    k = 0

```

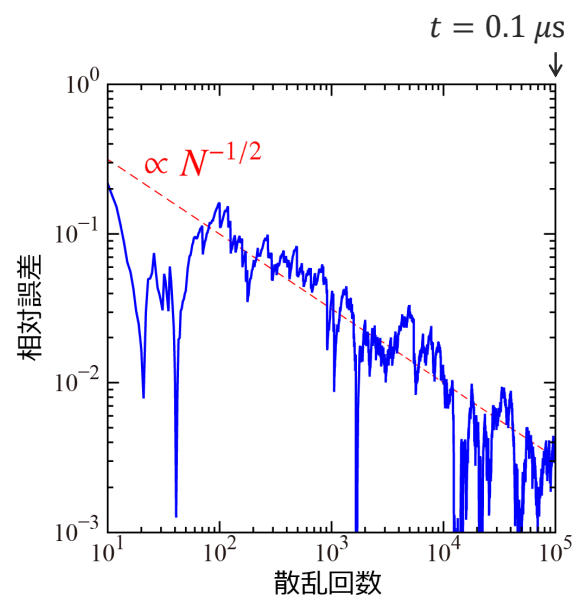
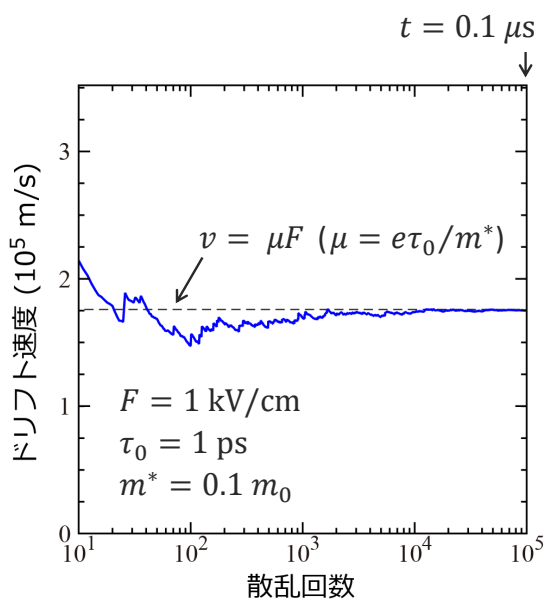


```

10 tf = -tau0 * log(r)
12 k(t + tf) = k(t) + (eF/hbar) * tf

```

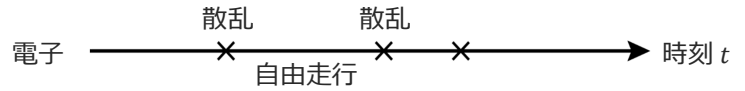
江崎モデル：シミュレーション例



アンサンブル・モンテカルロ法

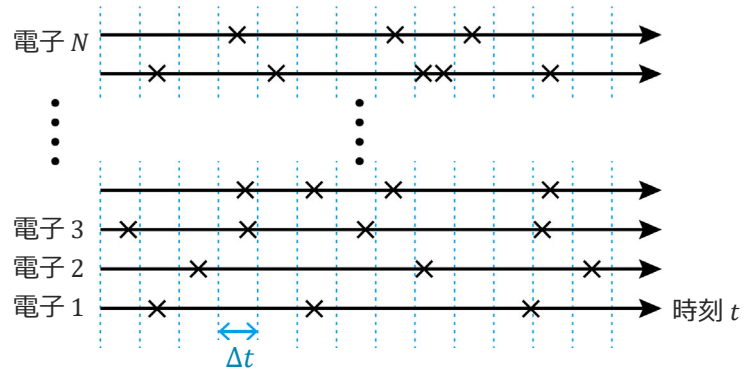
一粒子モンテカルロ法

電子1個のシミュレーションを長時間にわたり実行し、物理量の時間平均を求める
(定常状態のシミュレーション)



アンサンブル・モンテカルロ法

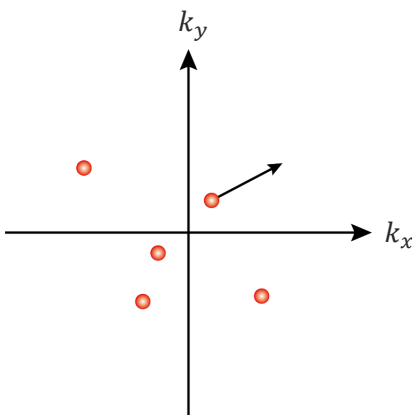
適当な初期条件からはじめて、多数の電子を同時に計算 (時間応答シミュレーション)



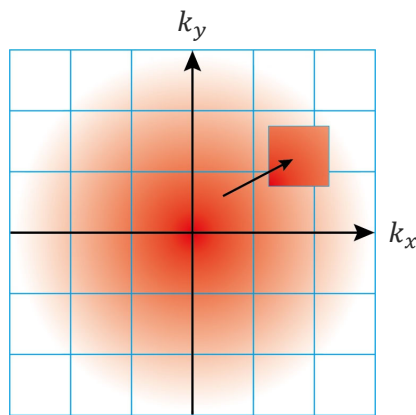
30

セルオートマトン

モンテカルロ (MC) セルオートマトン (CA)



位相空間におけるキャリアの運動を模擬



位相空間をセルに分割して、離散時間毎に分布関数を更新

K. Kometer *et al.*, PRB **46**, 1382 (1992)

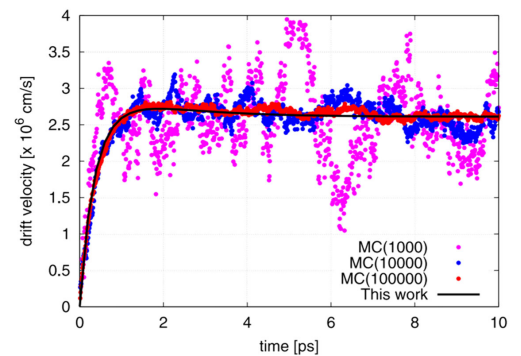
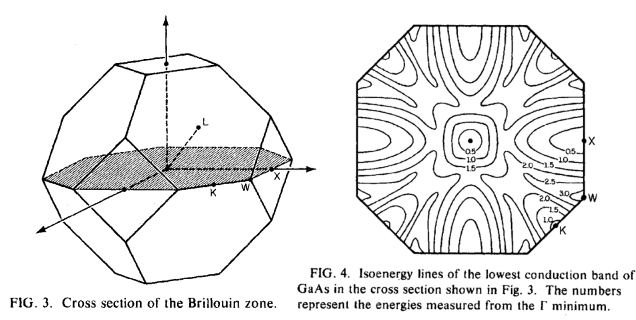
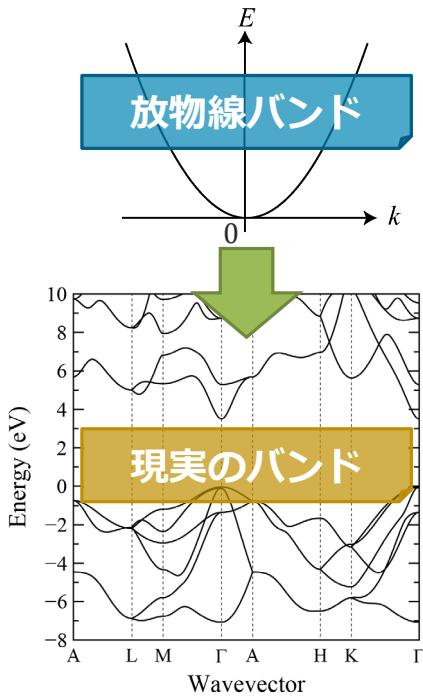


Fig. 4. (Color online) Comparison of drift velocity overshoot characteristics for low electric field condition 1 kV cm^{-1} . AlN 10 nm/GaN 10 nm/AlN 10 nm is assumed. Proposed cellular automaton method obtains smooth curve shown by black solid line, while Monte Carlo (MC) requires 100 000 particles to produce sufficiently smooth curve. Simulation CPU time is 8 h for 100 000 particles in Monte Carlo and 250 s by proposed method.

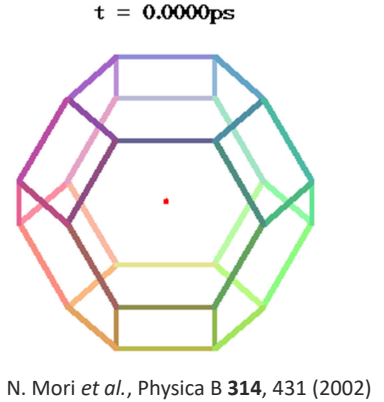
K. Fukuda *et al.*, JJAP **60**, SBBD04 (2021)

31

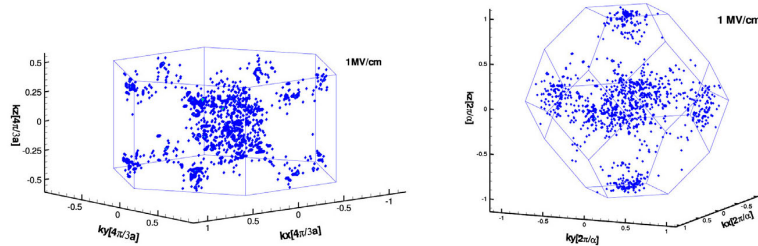
フルバンド・モンテカルロ法 (FBMC)



H. Shichijo & K. Hess, Phys. Rev. B **23**, 4197 (1981)



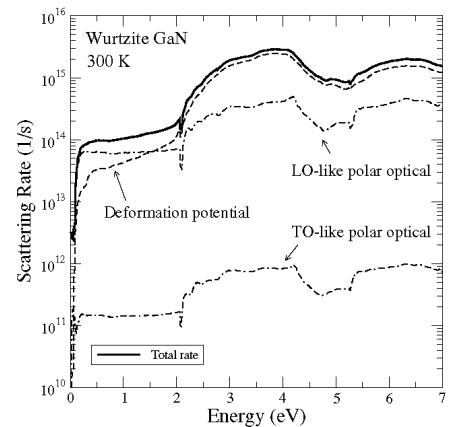
N. Mori *et al.*, Physica B **314**, 431 (2002)



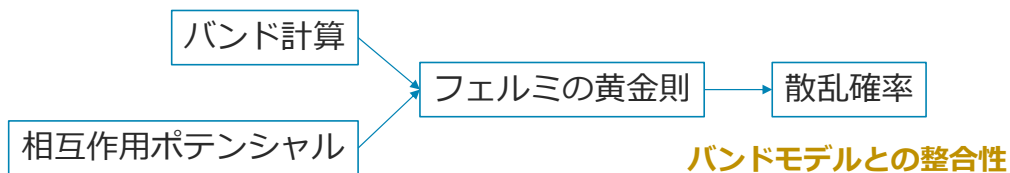
S. Yamakawa *et al.*, J. Phys.: Condens. Matter **21**, 174206 (2009)

現実的な散乱過程

- **フォノン**
音響, 光学; 変形ポテンシャル, 極性
- **不純物, 欠陥, 合金**
イオン化不純物, 中性不純物, 格子欠陥
- **キャリア**
二体散乱, プラズモン, 衝突電離

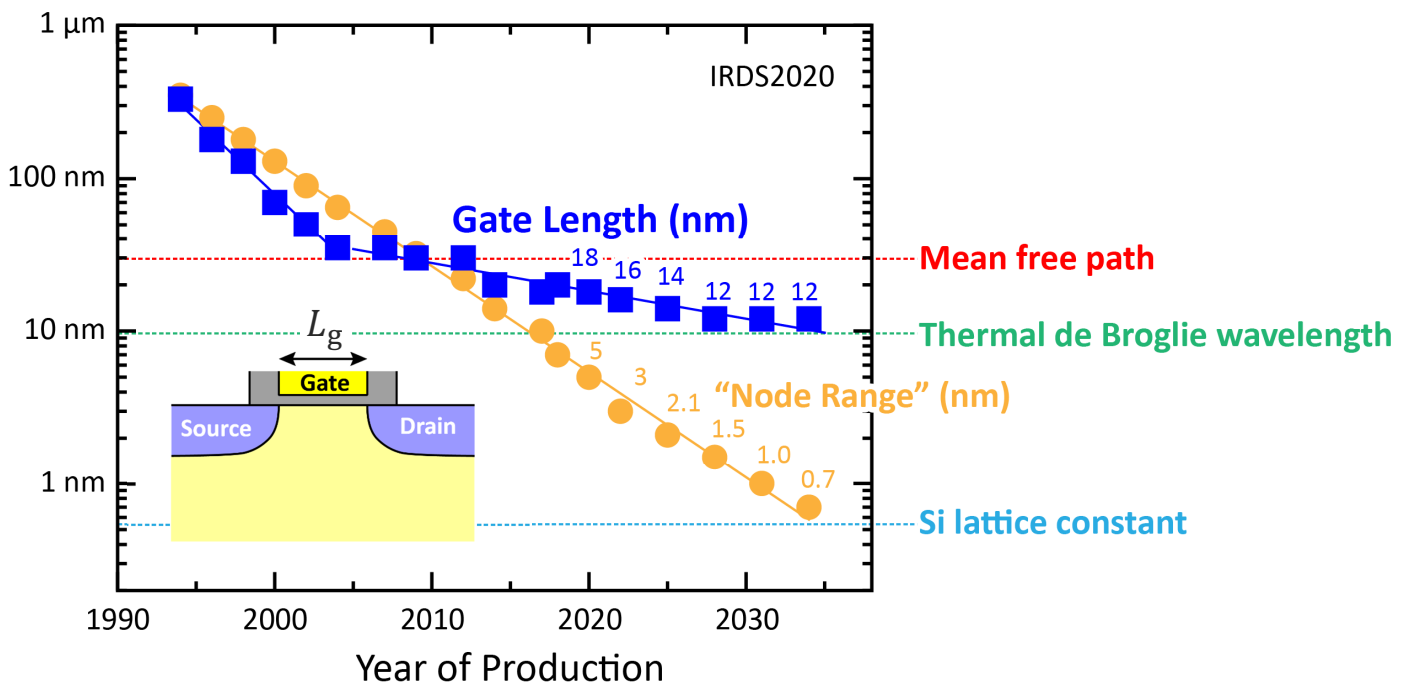


S. Yamakawa *et al.*, Semicond. Sci. Technol. **19**, S475 (2004)



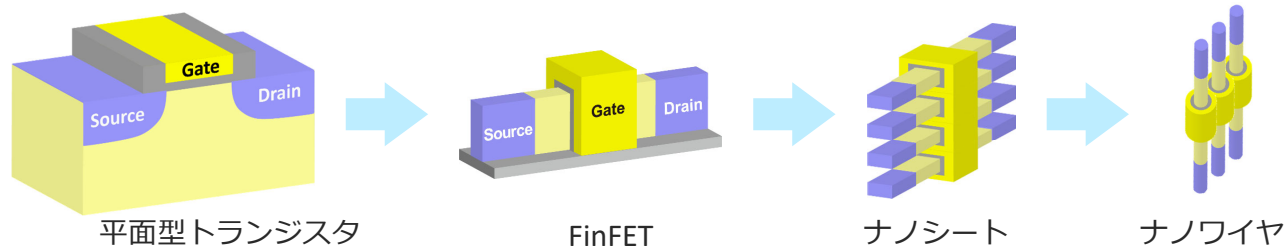
量子論デバイスシミュレーション

極限まで微細化されたトランジスタ



新構造・新材料・新原理デバイス

・ 新構造デバイス



・ 新材料

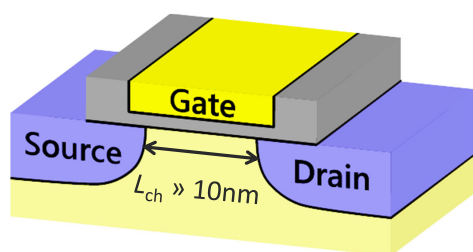
- ゲルマニウム, 化合物半導体, 2次元物質, ...

・ 新原理トランジスタ

- トンネルトランジスタ ($SS < 60 \text{ mV/dec}$), ...

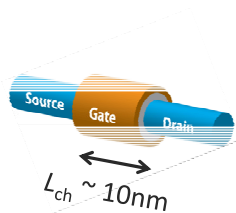
36

量子論デバイスシミュレータ



従来型トランジスタ

- 古典的に扱うことが可能
- ボルツマン輸送方程式
- 連続体モデル

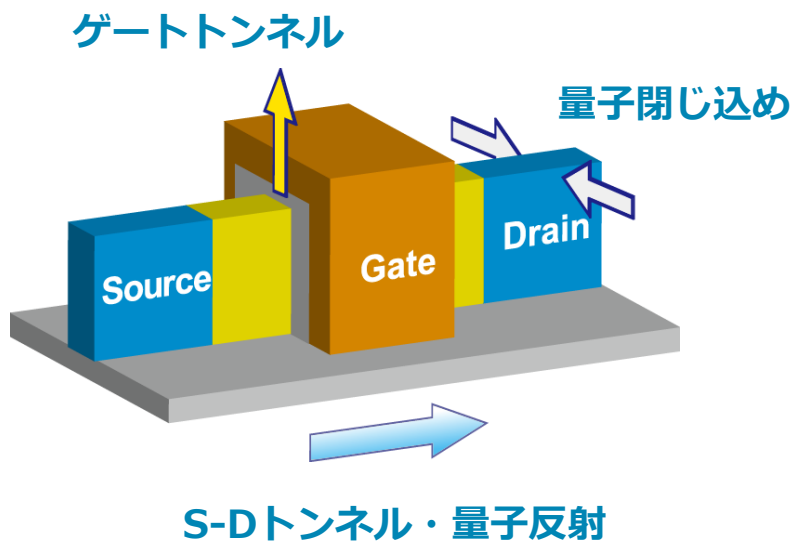


極微細トランジスタ

- 量子論・原子論的な効果が重要
- 量子輸送方程式 (非平衡グリーン関数法など)
- 原子論モデル

37

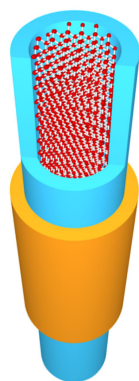
量子論的な効果



38

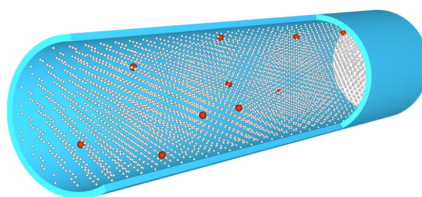
原子論的な効果

原子サイズ効果
フルバンド構造



(狭い実空間 ⇔ 広い波数空間)

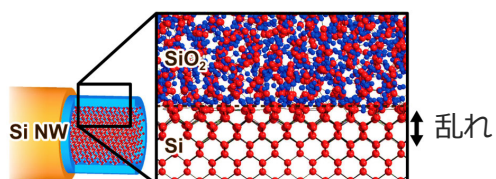
離散不純物



$$D = 3 \text{ nm}, L = 15 \text{ nm}, N_d = 10^{20} \text{ cm}^{-3}$$

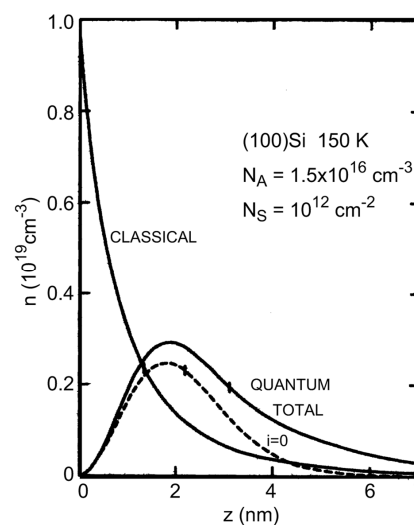
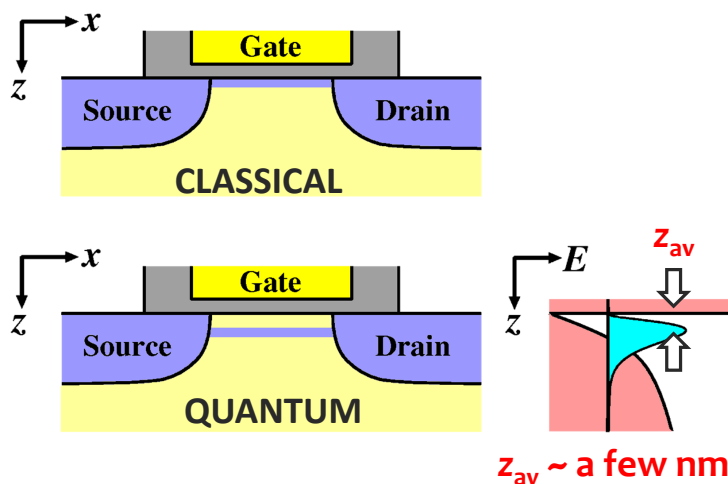
⇒ 不純物原子 10 個

原子配置乱れ



39

量子閉じ込め効果

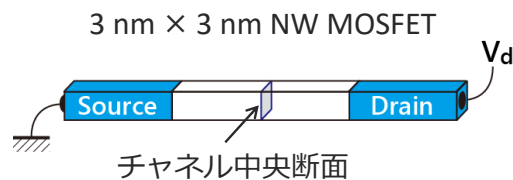
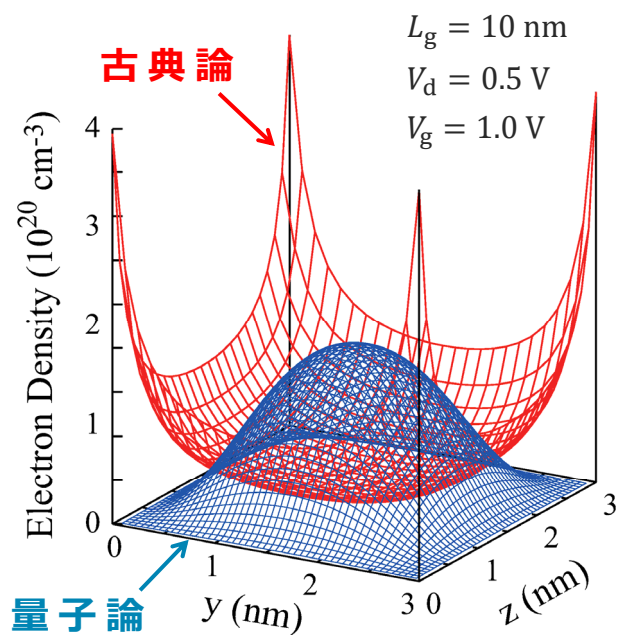


F. Stern, Crit. Rev. Solid State Sci. **4**, 499 (1974)

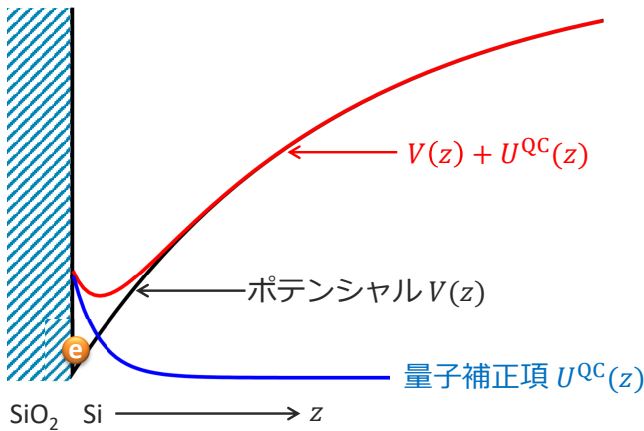
Quantum effects play an important role in the properties of the space-charge layer,
The charge density found quantum mechanically ... has its peak well inside the silicon.

T. Ando et al., Rev. Mod. Phys. **54**, 437 (1982)

ナノワイヤトランジスタの場合



量子補正モデル（古典的シミュレーション）



- 量子補正ポテンシャル [1]

$$U^{QC}(z) = -\frac{\hbar^2}{12m} \frac{\partial^2 \log n}{\partial z^2}$$

- 有効ポテンシャル [2]
- シュレディンガー補正法 [3]
- ボームポテンシャル法 [4]

[1] H. Tsuchiya and T. Miyoshi, IEICE Trans. Electron., **E82-C**, 880 (1999)

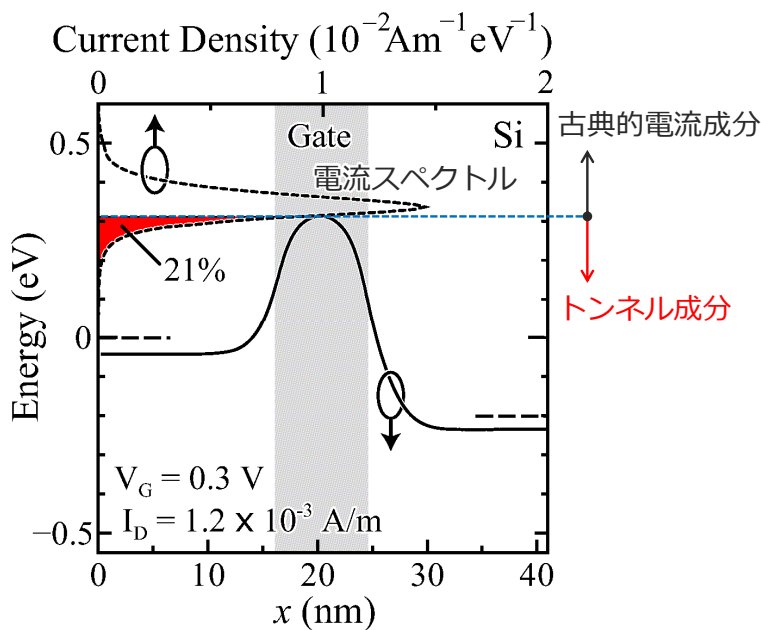
[2] D. K. Ferry *et al.*, IEDM 2000

[3] B. Winstead and U. Ravaioli, IEEE TED, **50**, 440 (2003)

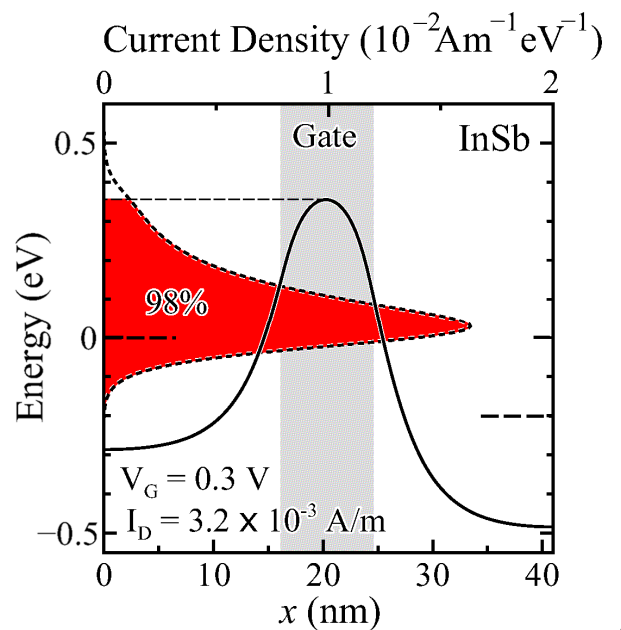
[4] B. Wu *et al.*, IEEE Trans. Nanotech., **2**, 291 (2003)

S-Dトンネル

Si DG-MOSFET

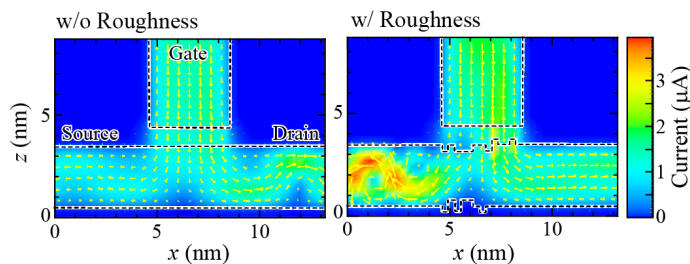
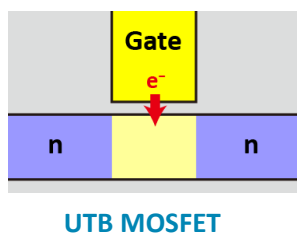


InSb DG-MOSFET

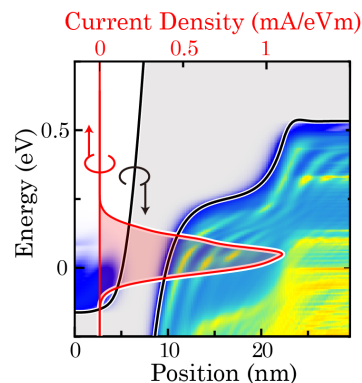
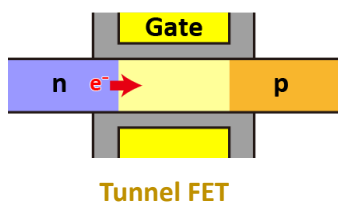


ゲートトンネル・バンド間トンネル

ゲートトンネル



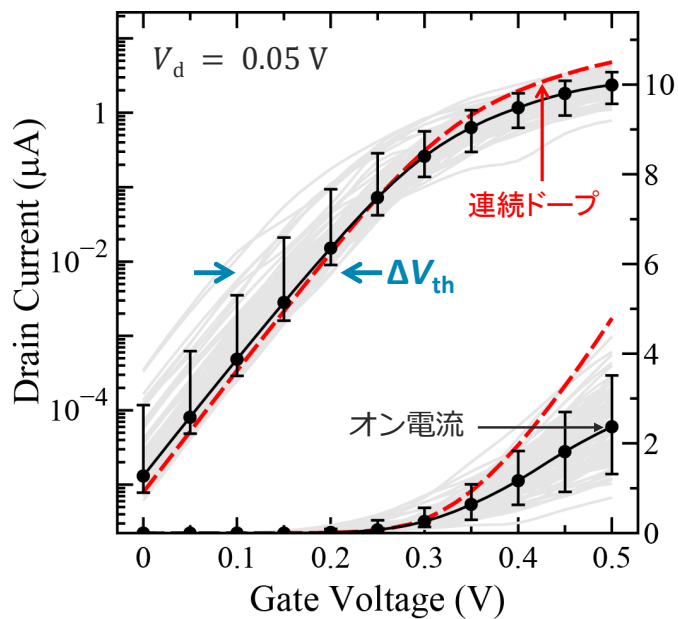
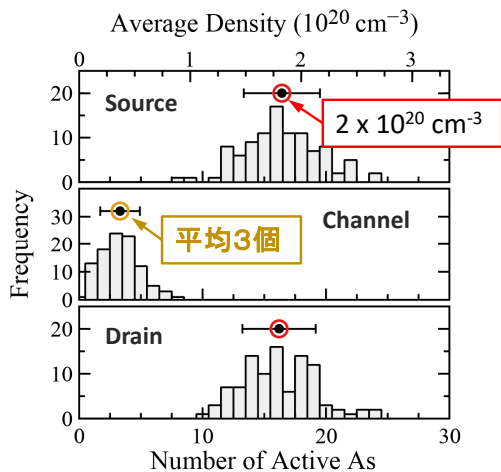
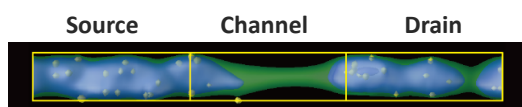
バンド間トンネル



44

離散不純物によるばらつき

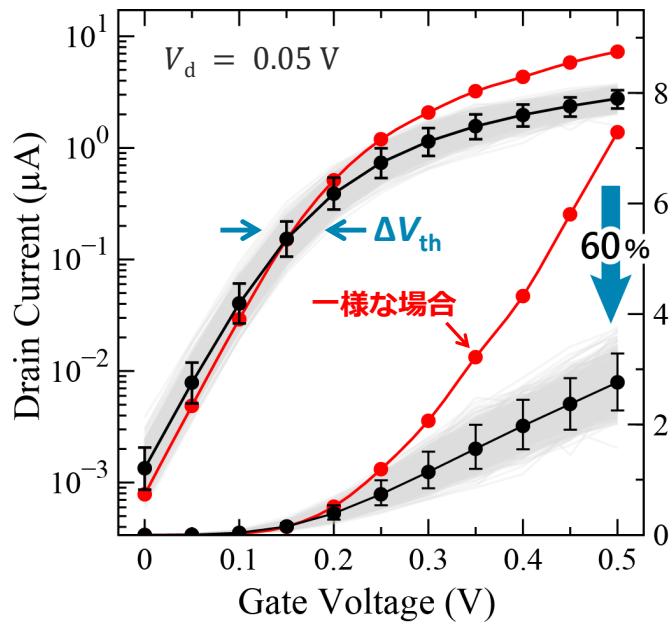
Si NW FET ($L_g = 10 \text{ nm}$, $3 \text{ nm} \times 3 \text{ nm}$ 断面)



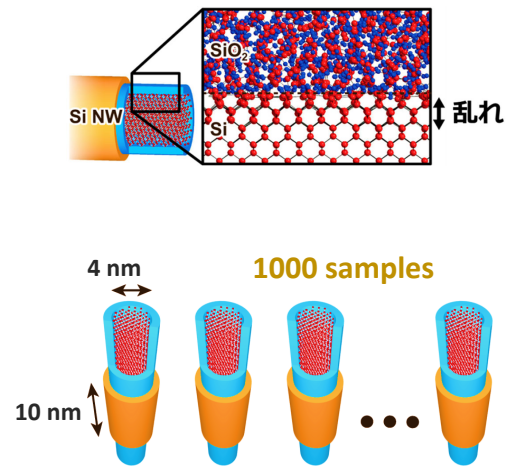
M. Uematsu et al., IEDM 2012

45

原子配置乱れによるばらつき



N. Mori *et al.*, IEDM 2013



46

非平衡グリーン関数法

47

粒子と波

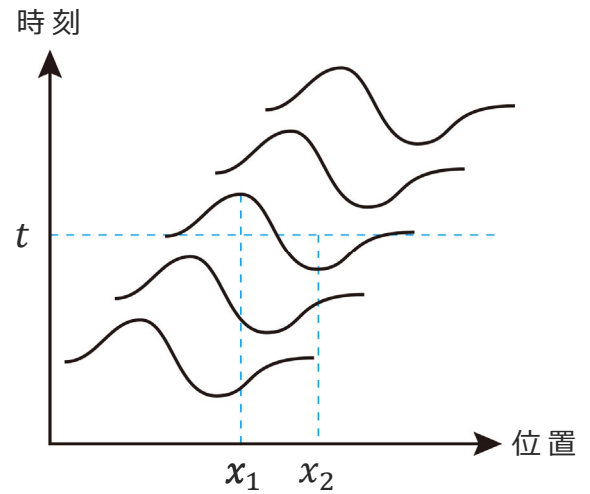
- 粒子

- ある時刻 t における位置 x と速度 v

- 波

- ある時刻 t において位置 x_1, x_2 の相関

- ある位置 x において時刻 t_1, t_2 の相関



相関関数

- 相関関数 $G^<(x, x'; t, t')$ を用いて電子系を記述

- いろいろな表現 (ウィグナー・ワイル変換)

① $(t, t') \Rightarrow$ 対角時間 $T = \frac{1}{2}(t + t')$, 交差時間 $\tau = t - t' \Rightarrow \tau$ をフーリエ変換 $\Rightarrow (E, T)$

$$\underline{G^<(x, x'; E, T)} = \int d\tau e^{iE\tau/\hbar} G^<(x, x'; \tau, T)$$

② $(x, x') \Rightarrow$ 対角座標 $X = \frac{1}{2}(x + x')$, 交差座標 $r = x - x' \Rightarrow r$ をフーリエ変換 $\Rightarrow (K, X)$

$$\underline{G^<(K, X; E, T)} = \int dr e^{-iK \cdot r} G^<(r, X; \tau, T)$$

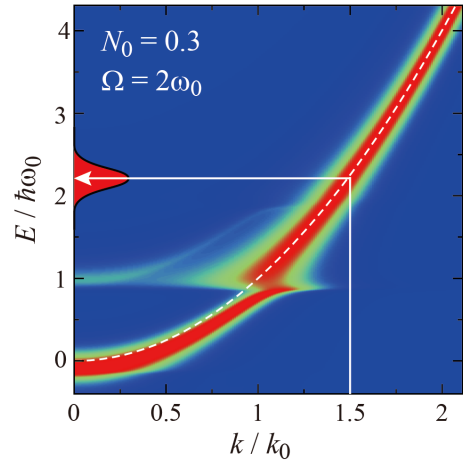
③ 定常状態 : $\underline{G^<(x, x'; E)}$, $\underline{G^<(K, X; E)}$

以下, $G^<(k, x; E)$ と表す

エネルギー変数について

- 古典的な分布関数 $f(\mathbf{k}, \mathbf{x})$
- 量子論的な相関関数 $G^<(\mathbf{k}, \mathbf{x}; E)$
 - \mathbf{k} が決まっても E は一意に定まらない
 - エネルギーが独立変数となる

GaAsナノワイヤのスペクトル関数



N. Mori et al., phys. stat. solidi (b) **204**, 268 (1997)

ウィグナー関数との関係

$$\begin{aligned}
 W(\mathbf{k}, \mathbf{x}; t) &= -i \int \frac{dE}{2\pi} G^<(\mathbf{k}, \mathbf{x}; E, t) \\
 &= -i G^<(\mathbf{k}, \mathbf{x}; \tau = 0, t)
 \end{aligned}$$

- 相関関数に比べて変数の数が1個少ない
- 交差時間 τ に関して局所的となるため、有限の時間におよぶ相互作用を閉じた形式でコンシステントに扱えない
- ボルツマンの輸送方程式のようなマルコフ的な散乱項に対してはメモリー効果が無視できるので単純な定式化が可能

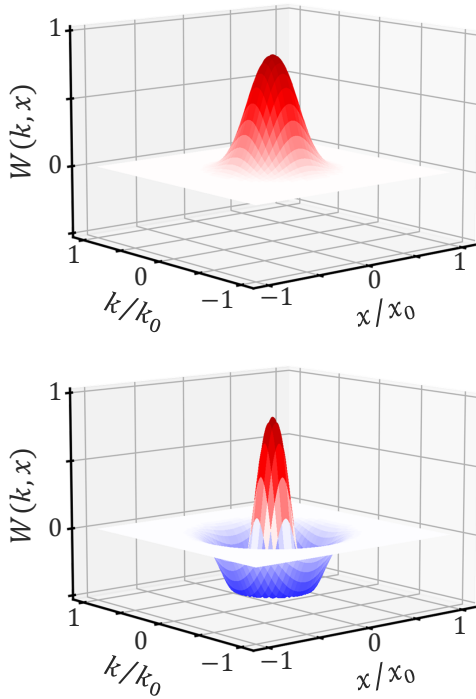
$$\frac{\partial W}{\partial t} - QW + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial W}{\partial \mathbf{x}} = \left. \frac{\partial W}{\partial t} \right|_{\text{scat}} \quad \longleftrightarrow \quad \frac{\partial f}{\partial t} - \frac{e\mathbf{F}}{\hbar} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{k}} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} = \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{\text{scat}}$$

ウィグナー・ボルツマン方程式

ボルツマン方程式

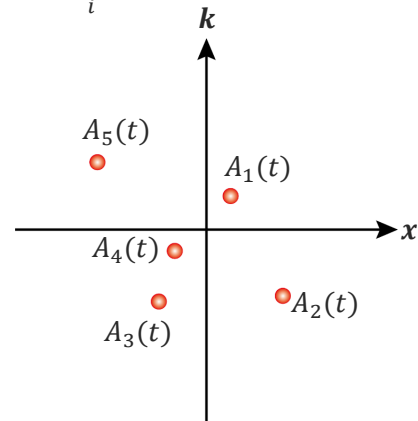
↳ 量子流体方程式 (量子ドリフト拡散)

ウィグナー・モンテカルロ法



- モンテカルロ粒子にAffinityと呼ばれる重みをつける
- Affinity $A_i(t)$ は負値を取りうる

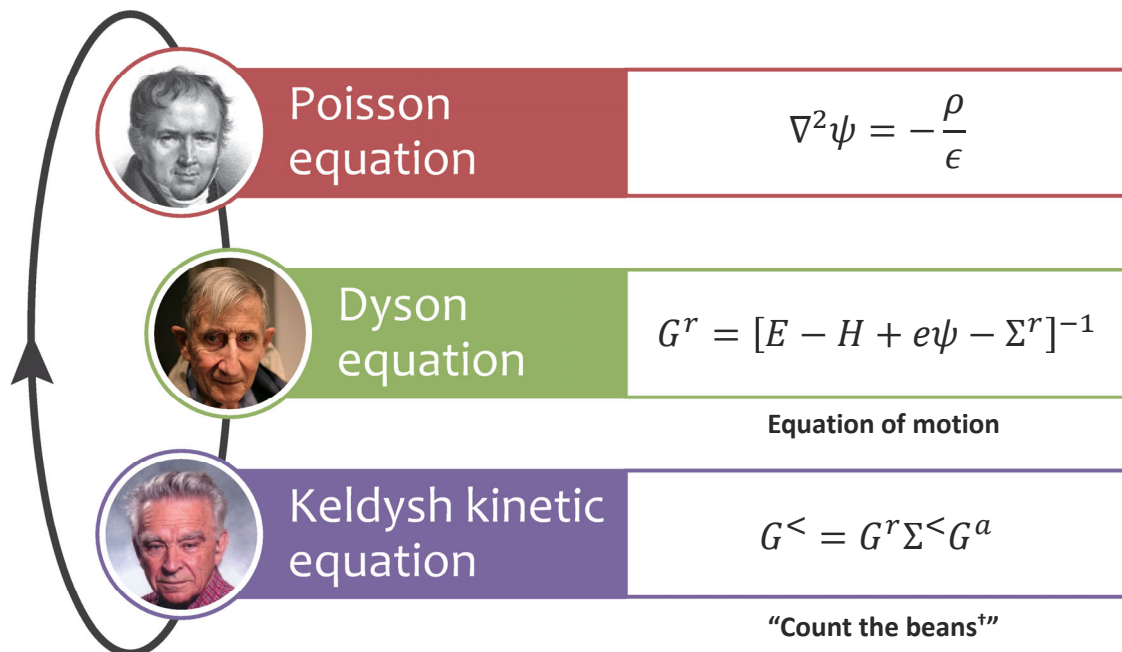
$$W(\mathbf{k}, \mathbf{x}, t) = \sum_i A_i(t) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i(t)) \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_i(t))$$



D. Querlioz and P. Dollfus, "The Wigner Monte Carlo method for nanoelectronic devices"
D.K. Ferry and M. Nedjalkov, "The Wigner function in science and technology"

52

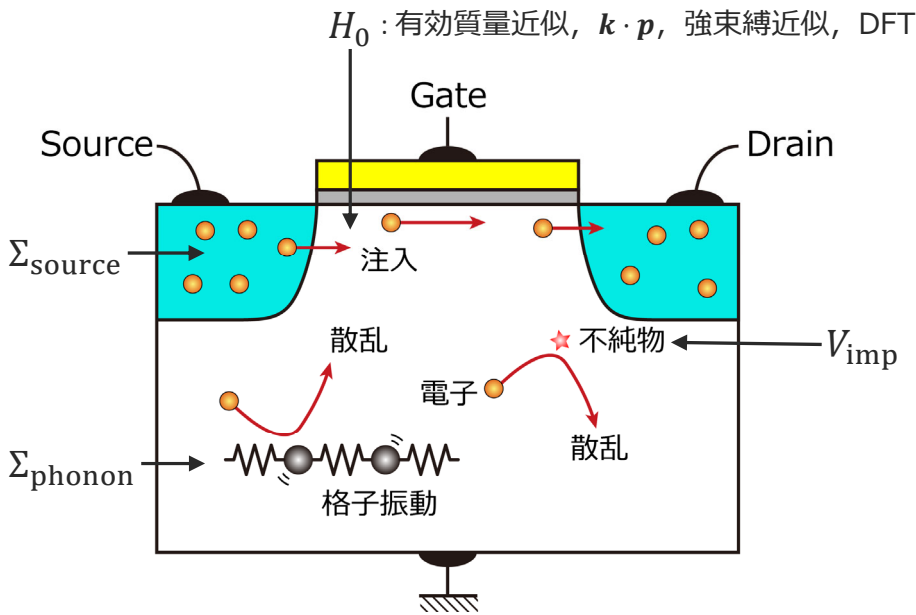
NEGFデバイスシミュレーション



†S. Datta, "Electronic Transport in Mesoscopic Systems," p. 300

53

デバイスの物理モデル



• Dysonの式

$$G^r = [E - H + e\psi - \Sigma^r]^{-1}$$

$$H = H_0 + V_{\text{imp}} + \dots$$

$$\Sigma = \Sigma_{\text{source}} + \Sigma_{\text{drain}} + \Sigma_{\text{phonon}} + \dots$$

• Keldyshの式

$$G^< = G^r \Sigma^< G^a$$

54

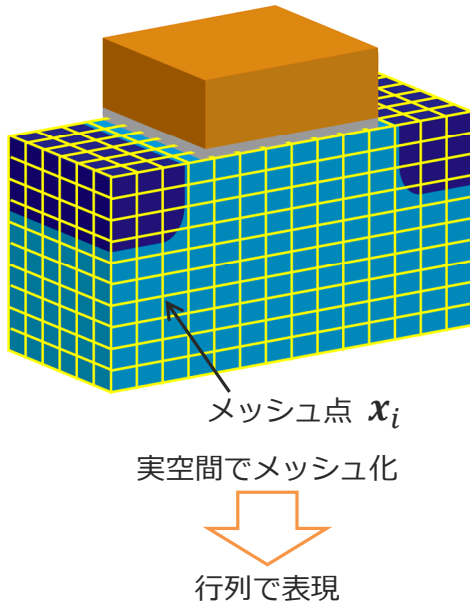
電子状態モデル

	原子論的效果	界面 新材料	計算コスト
連続体 ↑	有効質量近似 $k \cdot p$ 擾動法 		
↑	経験的強束縛近似 (TBM) 		
原子論 ↓	密度汎関数理論 (DFT) 		

55

数値計算手法

$G^r(x_i, x_j; E) \rightarrow$ 行列 $G_{ij}^r(E)$



• Dysonの式

$$G^r = [E - H + e\psi - \Sigma^r]^{-1}$$

➡ 逆行列演算

• Keldyshの式

$$G^< = G^r \Sigma^< G^a$$

➡ 行列の積

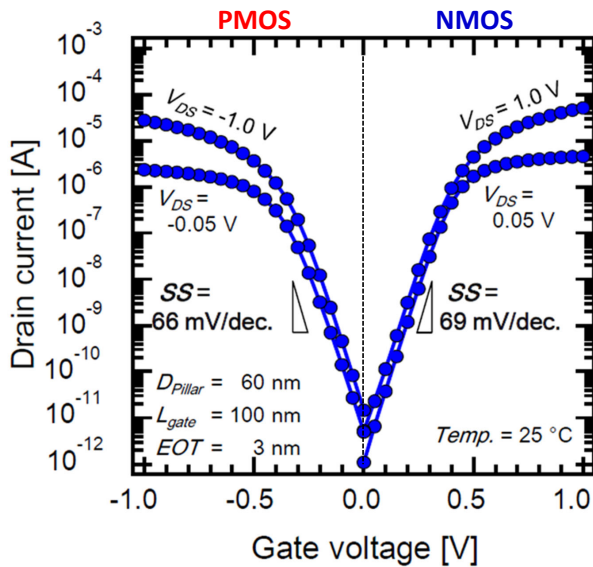
NEGFデバイスシミュレーター開発

- STARC 「ゲート長10nm世代を見据えた量子輸送シミュレータの開発」 (2004~2005)
- STARC 「量子輸送シミュレータを用いた新構造・新材料デバイスの性能予測」 (2006~2008)
- JST・CREST 「原子論から始まる統合シミュレータの開発」 (2009~2015)
- ポスト京 「新材料からの量子論デバイス創製シミュレータ開発」 (2015~2019)
- 富岳 「省エネルギー次世代半導体デバイス開発のための量子論マルチシミュレーション」 (2020~2022)



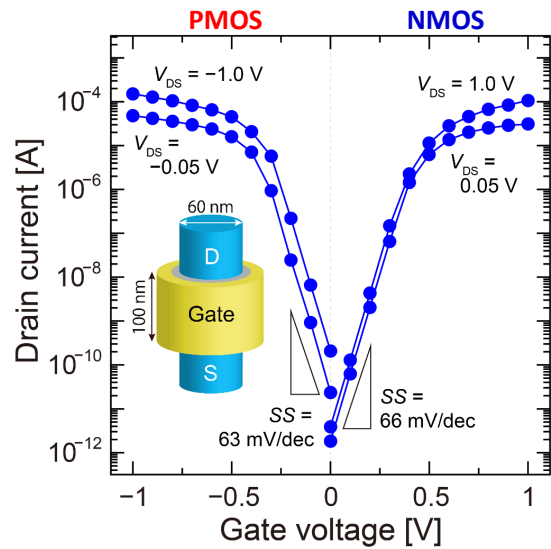
測定結果との比較（3次元シミュレーション）

測定結果



T. Imamoto *et al.*, Jpn. J. Appl. Phys. **54** 04DC11 (2015)

シミュレーション結果



⚠ 弾道輸送条件

第一原理NEGFデバイスシミュレータ

経験的なパラメータを必要としないシミュレーション環境

B1-I-01

Osaka, ISPSA 2016

R-matrix Theory and Real Space DFT Simulation of Si Nanowire Transistors

Nobuya MORI^{1*}, Gennady MIL'NIKOV¹, Jun-Ichi IWATA², and Atsushi OSHIYAMA²

¹Department of Electronic Engineering, Osaka University, 2-1 Yamada-oka, Suita, Osaka 565-0871, Japan

²Department of Applied Physics, The University of Tokyo, Hongo, Tokyo 113-8656, Japan

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

Simulation of Semiconductor Processes and Devices 2016
Edited by E. Bär, J. Lorenz, and P. Pichler

217

First Principles Based NEGF Simulations of Si Nanowire FETs

Mincheol Shin, Woo Jin Jeong, Jaehyun Lee and Junbeom Seo
School of Electrical Engineering
Korea Advanced Institute of Science and Technology
Daejeon 34141, Rep. of Korea
mshin@kaist.ac.kr

KAIST, SISPAD 2016

1-2

CNRS, SISPAD 2020

Ab-initio quantum transport with a basis of unit-cell restricted Bloch functions and the NEGF formalism

Marco Pala
Université Paris-Saclay, CNRS
Centre de Nanosciences et de Nanotechnologies
91120 Palaiseau, France
marco.pala@c2n.upsaclay.fr

David Esseni
DPIA
University of Udine
33100 Udine, Italy
david.esseni@uniud.it

ETH, Phys. Rev. Appl. 2020

Hybrid Mode-Space-Real-Space Approximation for First-Principles Quantum Transport Simulation of Inhomogeneous Devices

Fabian Ducry[✉], Mohammad Hossein Bani-Hashemian[✉], and Mathieu Luisier
Eidgenössische Technische Hochschule Zürich, 8092 Zürich, Switzerland

5372

IEEE TRANSACTIONS ON ELECTRON DEVICES, VOL. 68, NO. 11, NOVEMBER 2021



IMEC, IEEE TED 2021

Advanced DFT-NEGF Transport Techniques for Novel 2-D Material and Device Exploration Including HfS₂/WSe₂ van der Waals Heterojunction TFET and WTe₂/WS₂ Metal/Semiconductor Contact

A. Alzallan[✉], E. Akhondi[✉], G. Gaddemane[✉], R. Dufloy, and M. Houssa[✉]
(Invited Paper)

実空間密度汎関数法 (RSDFT)

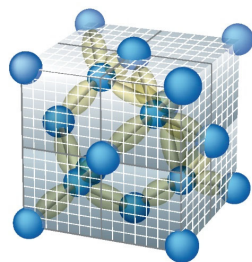
J.-I. Iwata *et al.*, J. Comp. Phys. **229**, 2339 (2010).
<https://www.rsdf.jp/>

実空間格子

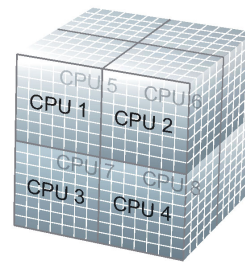
Kohn-Sham方程式



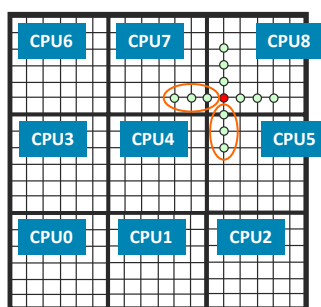
有限差分法



CPU空間



近隣CPUとのMPI通信のみ

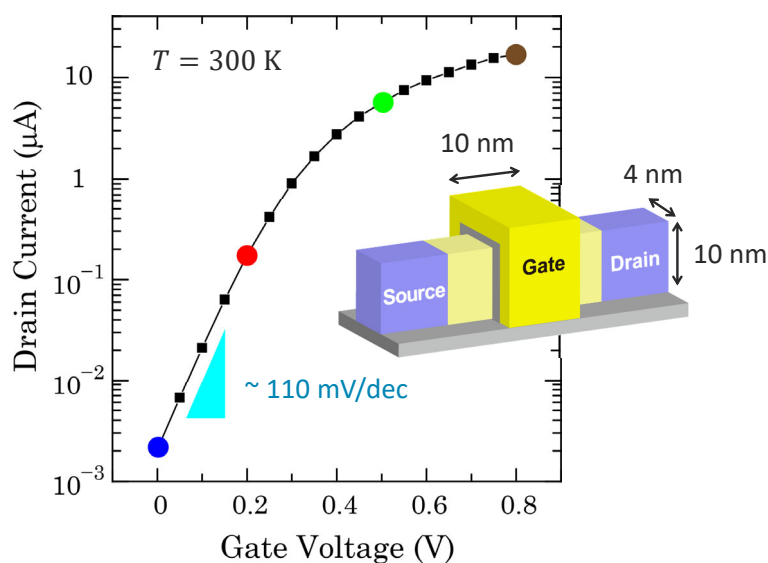


- ✓ 大規模並列計算に適している
 - 大規模系 (1万原子以上)
 - 高スケーラビリティ・高性能
2011年ゴードン・ベル賞
- ✓ デバイス幾何構造の表現に適している

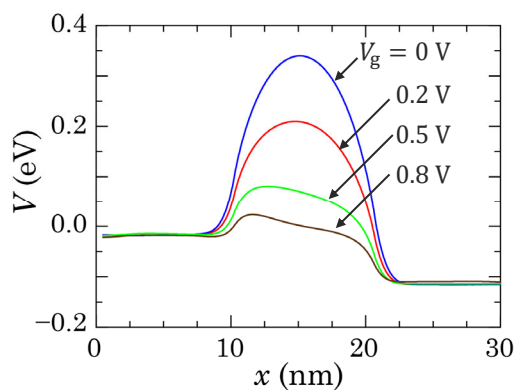
60

多くの計算資源・長い計算時間

n-Si FinFETの伝達特性



ポテンシャル分布



$N_{\text{atom}} = 69,465$, $N_{\text{CPU}} = 1,536$, $T_{\text{sim}} \sim 1 \text{ day}$

(京コンピュータ)

61

高速化計算手法

62

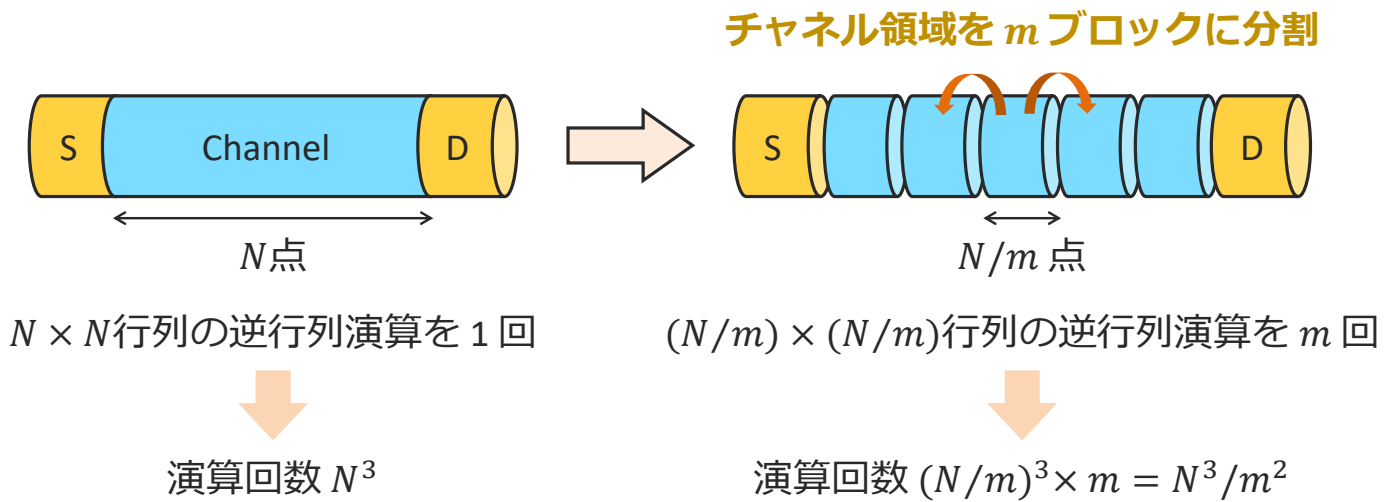
高速化計算手法

- 分割統治法
 - 再帰グリーン関数法 [1], R 行列法 [2]
- 行列次元削減法
 - モード空間展開法 [3], 接触ブロック還元法 [4], モデル低次元化法 [5], 等価モデル [6]
- 機械学習利用
 - CNN利用 [7], 等価モデル [8]

[1] R. Lake, G. Klimeck, R. C. Bowen, and D. Jovanovic, J. Appl. Phys. **81**, 7845 (1997). [2] G. V. Mil'nikov, N. Mori, Y. Kamakura, and T. Ezaki, Appl. Phys. Express **1**, 063001 (2008). [3] R. Venugopal, Z. Ren, S. Datta, and M. S. Lundstrom, J. Appl. Phys. **92**, 3730 (2002). [4] D. Mamaluy, M. Sabathil, and P. Vogl, J. Appl. Phys. **93**, 4628 (2003). [5] J. Z. Huang, W. C. Chew, J. Peng, C.-Y. Yam, L. J. Jiang, and G.-H. Chen, IEEE Trans. Electron Devices **60**, 2111 (2013). [6] G. Mil'nikov, N. Mori, and Y. Kamakura, Phys. Rev. B **85**, 035317 (2012). [7] S. Souma and M. Ogawa, IEICE ELEX **17**, 20190739 (2020). [8] J. Okada, F. Hashimoto, and N. Mori, Jpn. J. Appl. Phys. **60**, SBBH08 (2021).

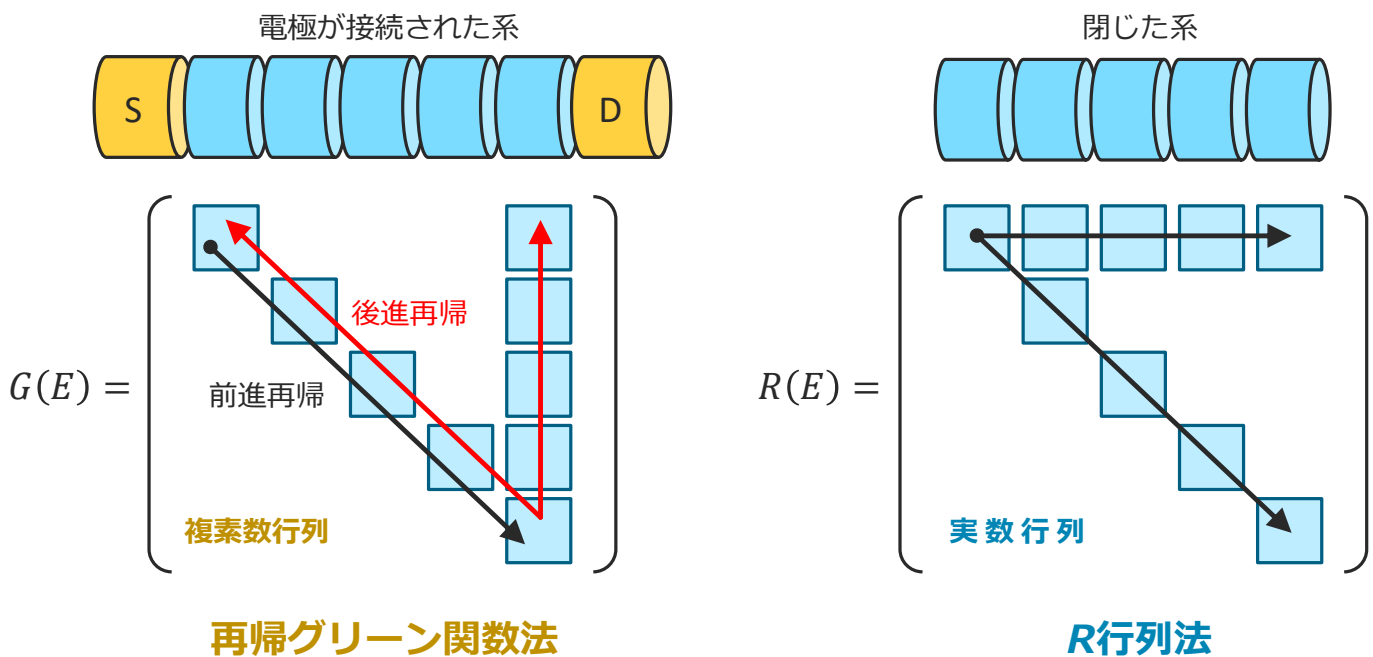
63

分割統治法に基づく高速化計算手法



- **再帰グリーン関数法** グリーン関数を再帰的に計算
- **R行列法** R行列（閉じた系のグリーン関数の表面成分）を伝搬

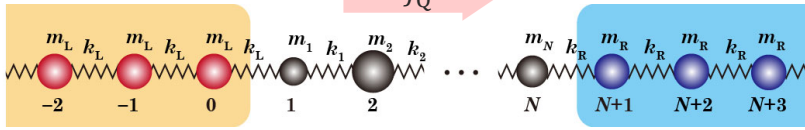
再帰グリーン関数法とR行列法



フォノン輸送への応用

Left reservoir @ $T + \Delta T$

Right reservoir @ T



- ダイナミカル行列 $D_{ij} = \frac{\partial^2 V(\mathbf{x})}{\partial x_i \partial x_j}$, $H_{ij} = \frac{D_{ij}}{\sqrt{m_i m_j}}$

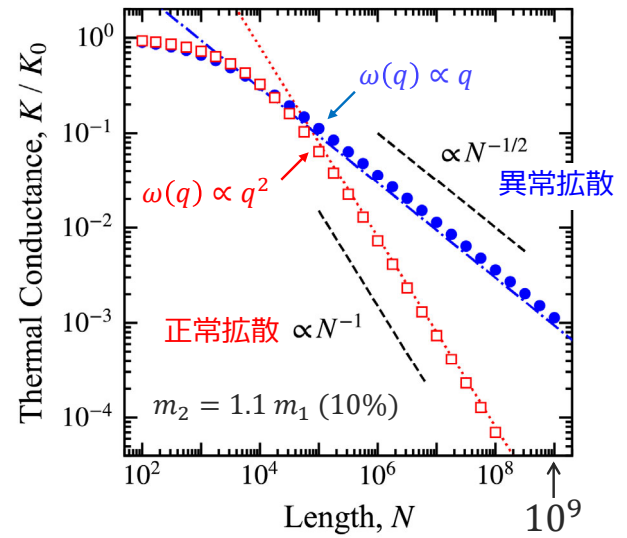
- グリーン関数 $G(\omega) = [\omega^2 - H - \Sigma_L(\omega) - \Sigma_R(\omega)]^{-1}$

R行列法 メモリ使用量が原子数に依存しない

- 透過関数 $\Pi(\omega) = \text{Tr}[\Gamma_L(\omega)G(\omega)\Gamma_R(\omega)G^+(\omega)]$

- 熱流 $J_Q = \int \frac{\hbar\omega}{2\pi} \Pi(\omega) [N_L(\omega) - N_R(\omega)] d\omega$

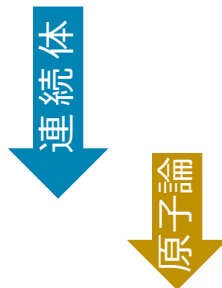
- 熱コンダクタンス $K = \frac{J_Q}{\Delta T}$ ($kT \gg \hbar\omega_0$)



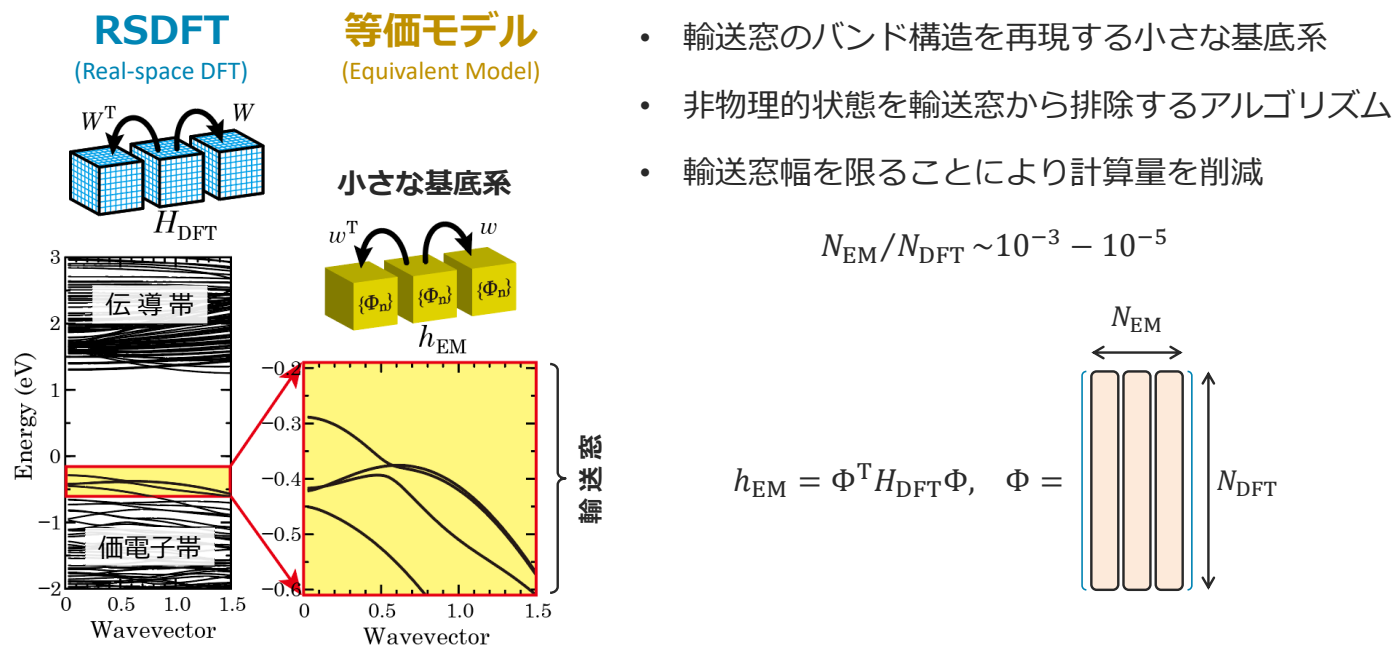
N. Mori et al., APL Mater. 9, 081112 (2021)

行列次元削減法に基づく高速化計算手法

- モード空間展開法
- 接触ブロック還元法
- モデル低次元化法
- 等価モデル



等価モデル



Mil'nikov *et al.*, Phys. Rev. B **85**, 035317 (2012)

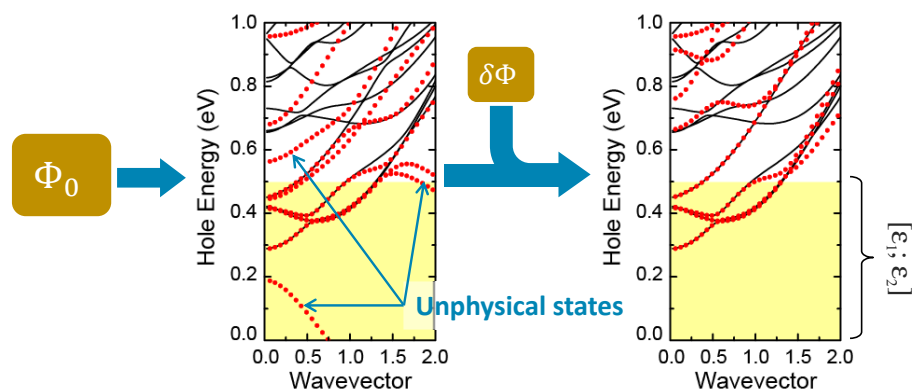
68

等価モデルの構築法

- 輸送窓内のブロッホ状態から初期基底系を構築

$$\Phi_0 = \{\Psi_{nk}\}: \varepsilon \in [\varepsilon_1: \varepsilon_2]$$

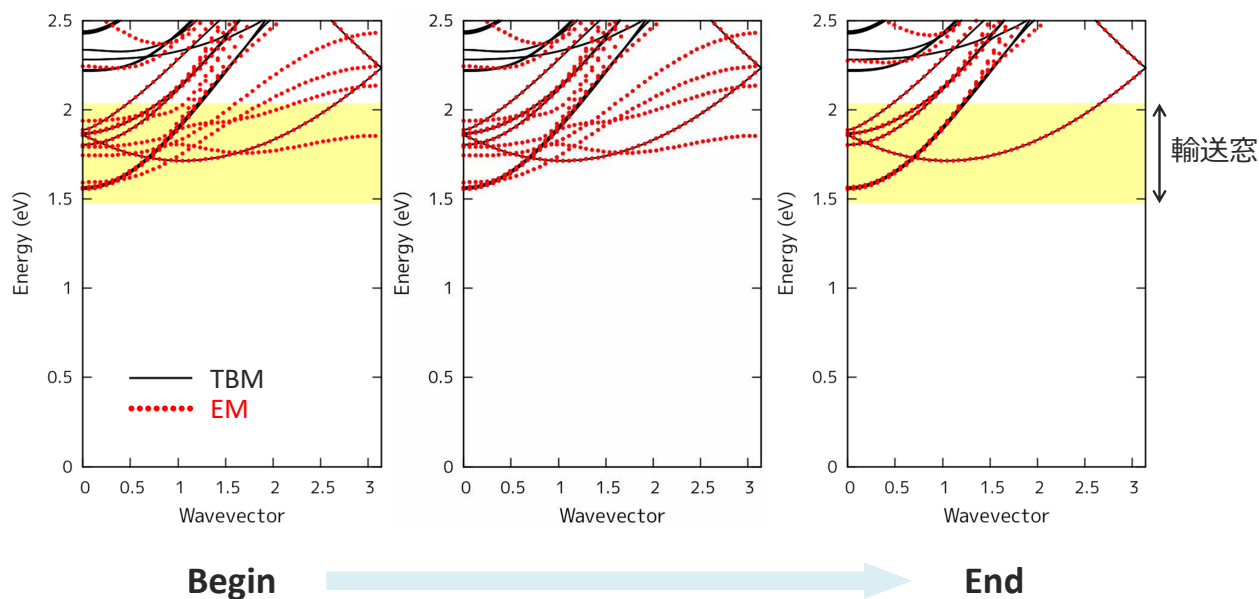
- 輸送窓内に非物理状态が現れる
- 追加の状态を加えて，輸送窓内の状态密度を極小化（変分計算）



69

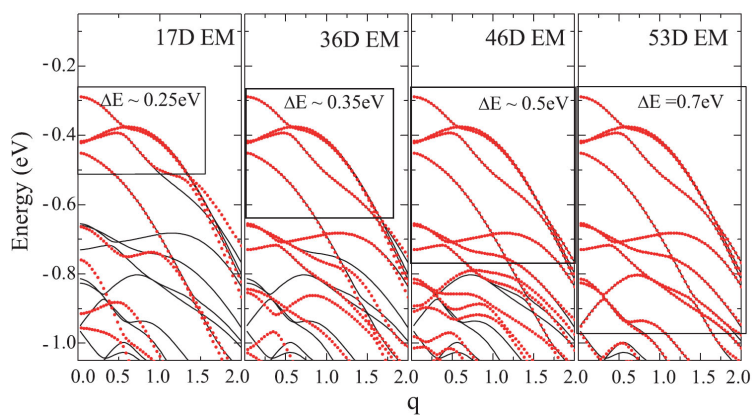
変分計算の例

2.2 nm x 2.2 nm [100] n-Si NW, sp^3s^*

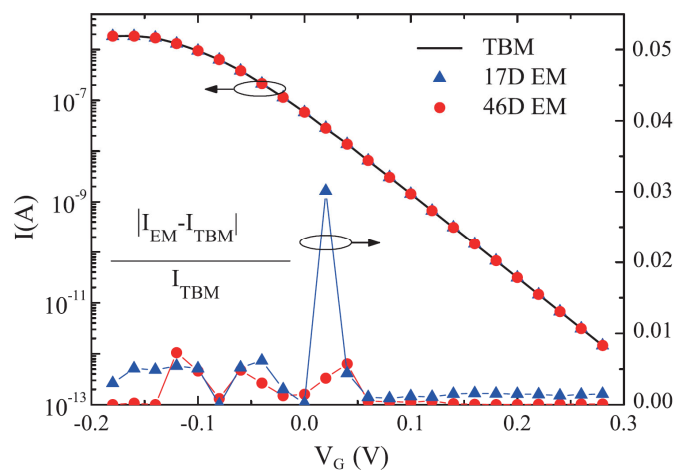


70

p型シリコンナノワイヤへの応用



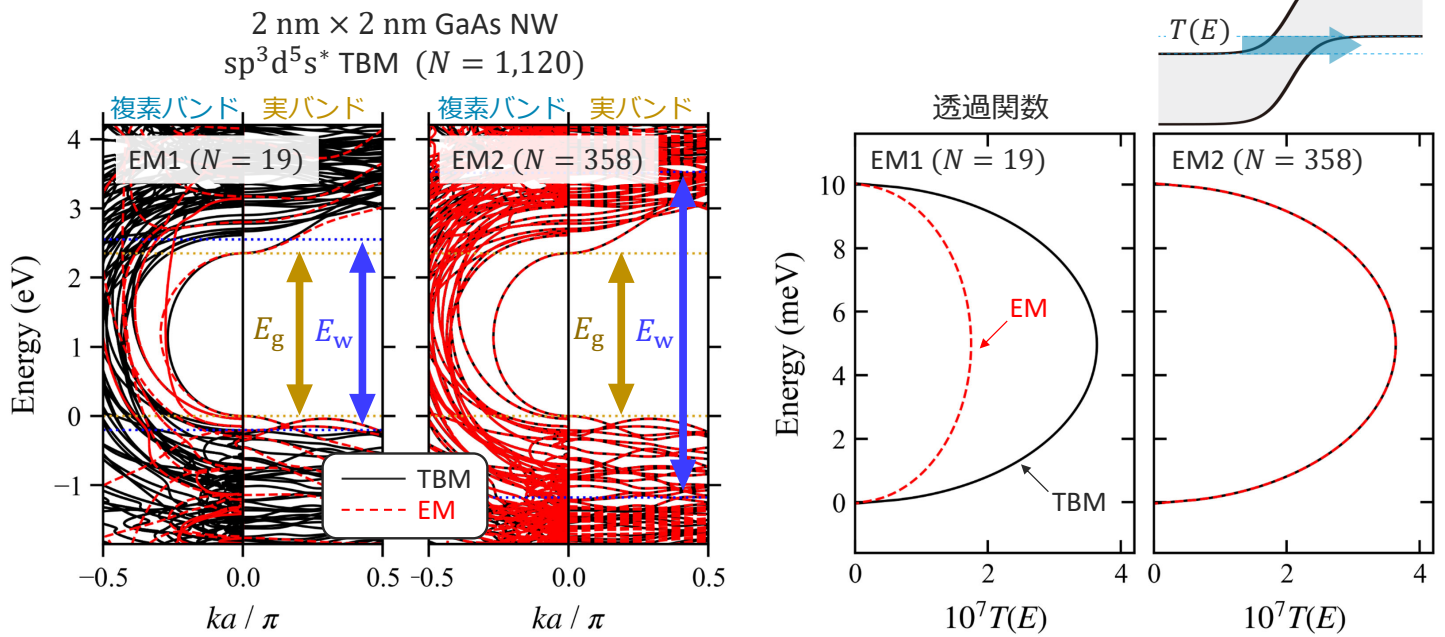
p-Siナノワイヤ (2.2 nm × 2.2 nm)



p-SiナノワイヤFETの伝達特性

71

バンド間トンネルについて



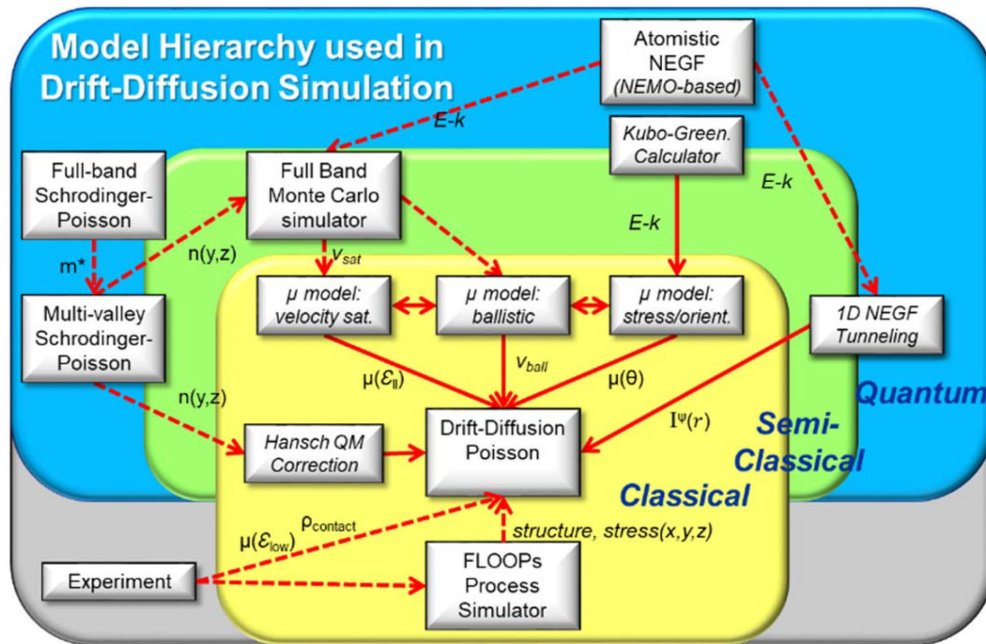
J. Okada *et al.*, SSDM 2022

72

最近の話題

73

モデル階層 @ Intel



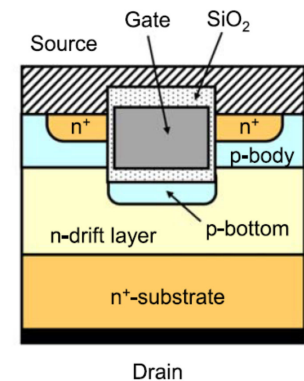
Mark Stettler, Intel Corporation, "State-of-the-art TCAD: 25 years ago and today," IEDM 2019

パワーデバイスのシミュレーション

- チャンネル長が長く古典的に扱うことが可能
 - モンテカルロ, ドリフト拡散, エネルギー輸送
- フルバンド構造・移動度モデリング・衝突電離
- 非常に高い電界下における量子効果
 - ワニエ・シュタルク局在 (ブロッホ振動) [1]
 - 散乱内電界効果 [2]

SiC Trench MOSFET

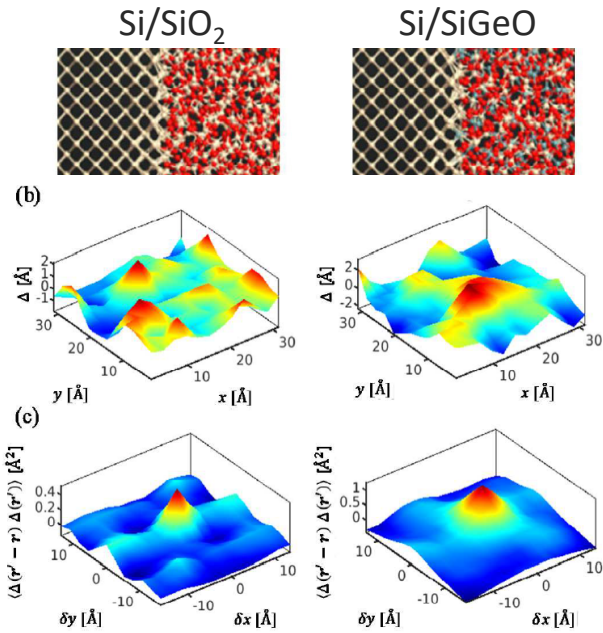
Channel length $\sim 1 \mu\text{m}$



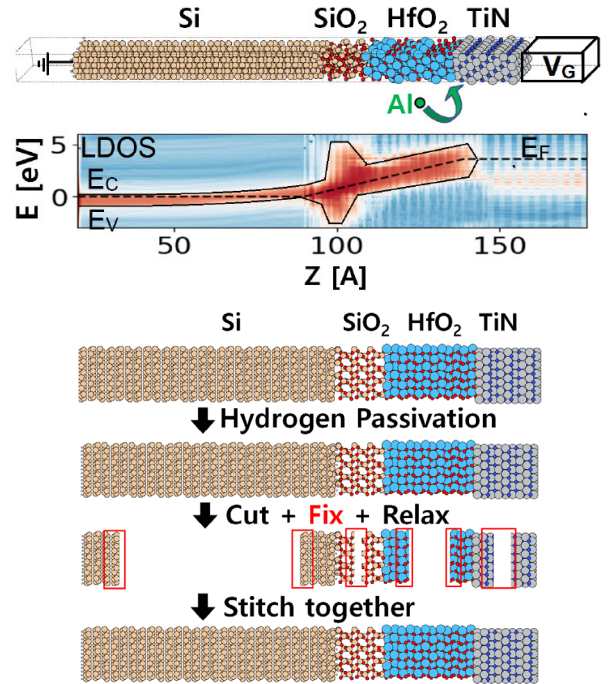
[1] H. Tanaka, T. Kimoto, and N. Mori, APEX **13**, 041006 (2020)

[2] S. Makihira and N. Mori, JJAP **58**, SCCB26 (2019)

新材料：絶縁膜，ゲート金属



K. Vuttivorakulchai *et al.*, SISPAD 2021



H. Ilatikhameneh, SISPAD 2019

3次元異種材料集積

配線工程 (BEOL) の制約に適合する高品質材料

- 低温プロセス (450度以下)
- 乱れた表面・平らでない表面
 - 結晶半導体
 - アモルファス半導体
 - 酸化物半導体
 - 2次元物質
 - トポロジカル絶縁体

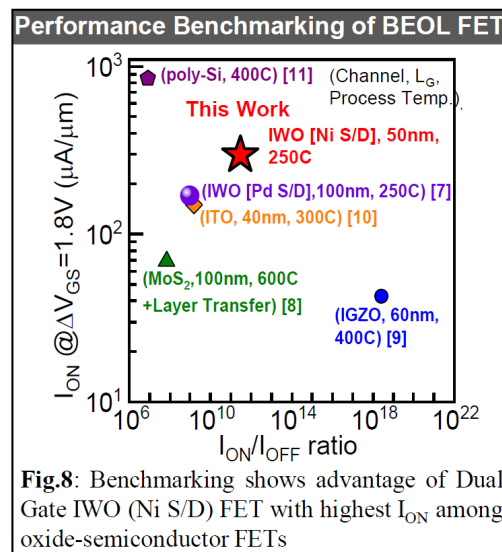
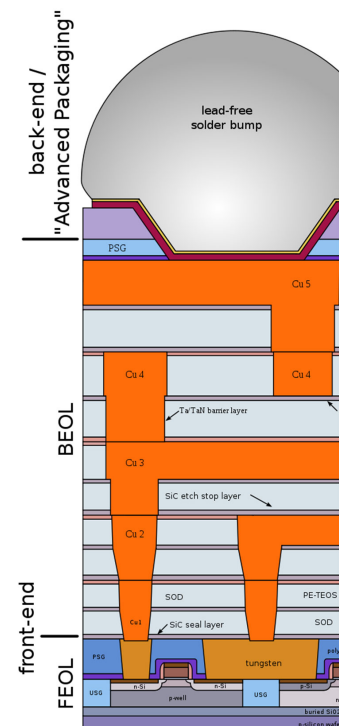


Fig.8: Benchmarking shows advantage of Dual Gate IWO (Ni S/D) FET with highest I_{ON} among oxide-semiconductor FETs

H. Ye *et al.*, IEDM 2020



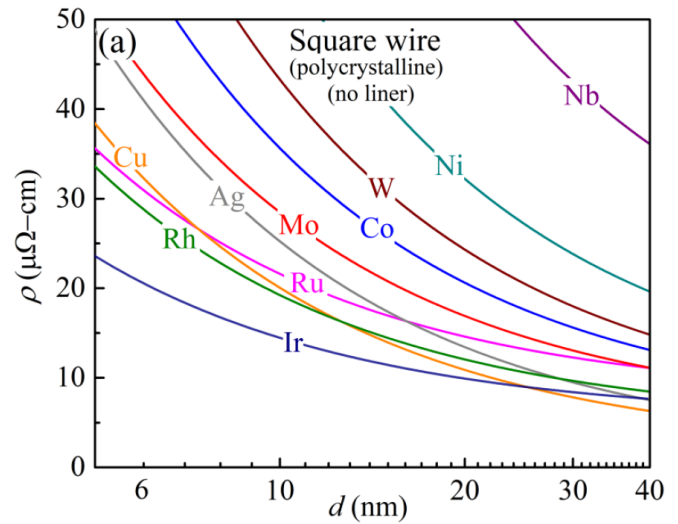
ナノスケール層間配線

• Cu層間配線

– 線幅 < 平均自由行程 (~ 40 nm) → 高抵抗

Metal	Effective electron mean free path, λ_{eff} (nm)	
	Experiment	Simulation
Cu(001)	39	39.9
Ag(001)	39	53.3
Ta(001)	28	3.21
Ni(001)	26	5.87
W(001)	33	19.1 ^a
W(110)	19	11.2 ^a
Nb(001)	20	2.36
Nb(110)	20	
Co(0001)	19	11.8/7.78
Mo(001)	17	11.2
Mo(110)	15	
Rh(001)	11	6.88
Ru(0001)	6.7	6.59/4.88
Ir	6.4	7.09

^aThe simulated values for W are specific for 001 and 110 oriented layers.³²

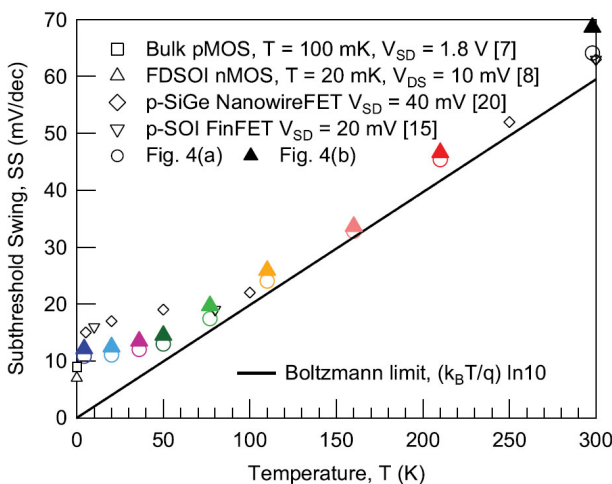


D. Gall, J. Appl. Phys. **127**, 050901 (2020)

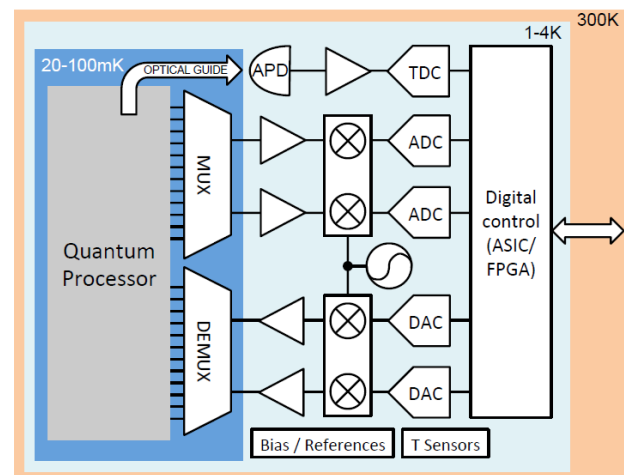
低温CMOS

- 消費電力・発熱の増大
- 同時に動作可能なトランジスタ割合の減少
- 量子コンピュータの制御@極低温

低温CMOS

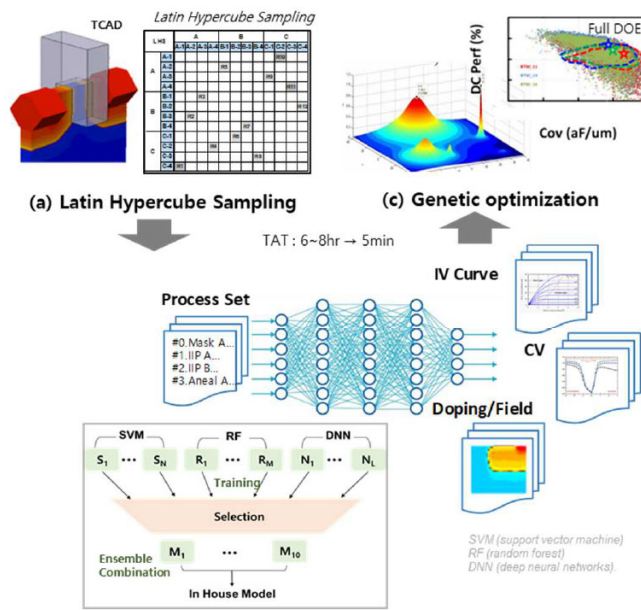


A. Beckers et al., IEEE EDL **41**, 276 (2020)

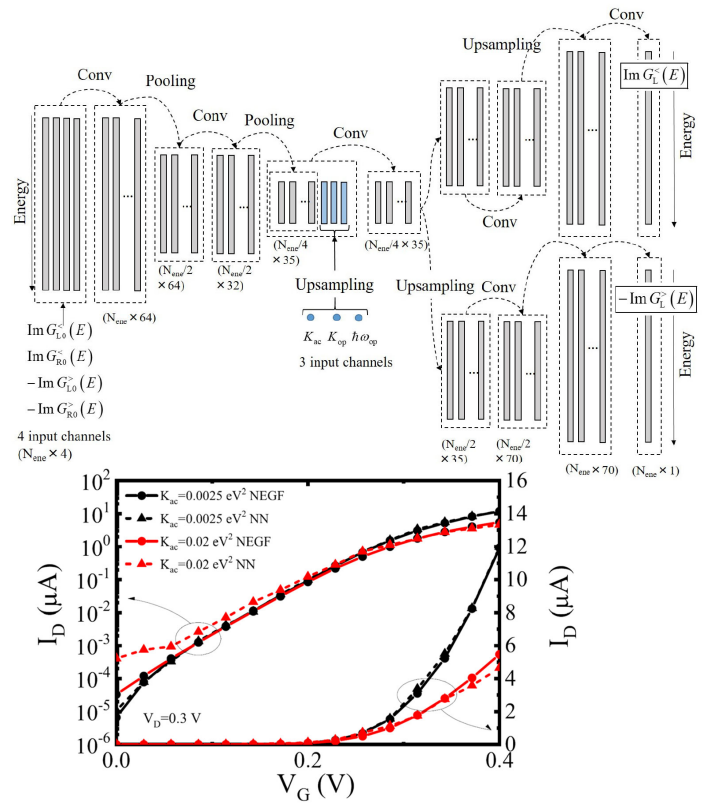


E. Charbon et al., IEDM 2016

機械学習利用



(a) Latin Hypercube Sampling (b) Response surface model with ensemble combination (c) Genetic optimization
 Fig 9. Machine-learning based device optimization
 U. Kwon *et al.*, SISPAD 2021



S. Souma & M. Ogawa, SISPAD 2021

まとめ

- 半導体デバイスシミュレーション
- 半古典論デバイスシミュレーション
 - ドリフト拡散, モンテカルロ法
- 量子論デバイスシミュレーション
 - 量子論的効果, 原子論的効果
- 非平衡グリーン関数法 (NEGF法)
 - 原理・物理モデル, 数値計算手法, 高速計算手法



紹介した研究内容の一部はJSPS 科研費JP20H00250, および文部科学省「富岳」成果創出加速プログラム「省エネルギー次世代半導体デバイス開発のための量子論マルチシミュレーション」の助成を受けたものです。また, Impulse TCADに関して, 産業技術総合研究所 服部 淳一 博士からスライドの提供を受けました。

アドバンスソフト からの情報提供

1. セミナー 今後の予定

2. 当社最新情報

3. シミュレーションサービスについて

1. アドバンスシミュレーション・セミナー 今後の予定

No.	開催日	講師の先生方	テーマ
第5回	10月28日(金)	国立研究開発法人 宇宙航空研究開発機構 宇宙科学研究所 准教授 高木 亮治 様	流体・HPC
第6回	11月11日(金)	国立研究開発法人 海洋研究開発機構 付加価値情報創成部門 研究員 廣部 紗也子 様 グループリーダー代理 西浦 泰介 様	産業応用を見据えた JAMSTECの研究開発
第7回	11月25日(金)	東京大学大学院 工学系研究科 マテリアル工学専攻 教授 渡邊 聡 様	ナノ・AI
第8回	12月 9日(金)	東北大学 流体科学研究所 航空機計算科学センター 教授 大林 茂 様	流体・データ同化
第9回	12月23日(金)	国立研究開発法人 海洋研究開発機構 付加価値情報創成部門 主任研究員 土井 威志 様 グループリーダー 松岡 大祐 様 主任研究員 宮腰 剛広 様	JAMSTECの 最先端地球科学

1.製品紹介セミナー 今後の予定

開催日	タイトル	講演概要
10月20日(木)	音響解析ソフトウェア「Advance/FrontNoise Ver.6.0」ご紹介セミナー	音響解析ソフトウェア Advance/FrontNoise Ver.6.0 の新機能をご紹介します。 また、今回のセミナーでは招待講演といたしまして、同志社大学理工学部 情報システムデザイン学科 教授 土屋 隆生 様に「FDTD 法による大規模音場解析」をご講演いただきます。
11月10日(木)	NanoLabo 新機能 新製品 NeuralMD Pro ご紹介セミナー	NanoLabo の新機能や新製品 NeuralMD Pro のデモンストレーションや解析事例をご紹介します。
11月17日(木)	アドバンスソフトの半導体デバイス、電磁波解析のご紹介セミナー ～DX、グリーンイノベーションを加速する数値解析シミュレーションのご紹介～	半導体デバイス 3次元 TCAD システム【Advance/TCAD】電磁波解析ソフトウェア【Advance/ParallelWave】を中心に、半導体デバイス解析、電磁波解析、関連の数値解析シミュレーションサービスについてご紹介いたします。

アドバンスソフトからの情報提供

1. セミナー 今後の予定
2. **当社最新情報**
3. シミュレーションサービスについて

2. 弊社最新情報

弊社パッケージソフトご紹介セミナーのご案内

◆ 2022年10月20日(木)

音響解析ソフトウェア

「Advance/FrontNoise Ver 6.0」ご紹介セミナー

◆ 2022年11月10日(木)

NanoLabo 新機能、

新製品「NeuralMD Pro」ご紹介セミナー

5

弊社パッケージソフトご紹介セミナーのご案内

◆ 2022年11月17日(木)

アドバンスソフトの半導体デバイス、電磁波解析のご紹介セミナー

～DX、グリーンイノベーションを加速する数値解析シミュレーションのご紹介～

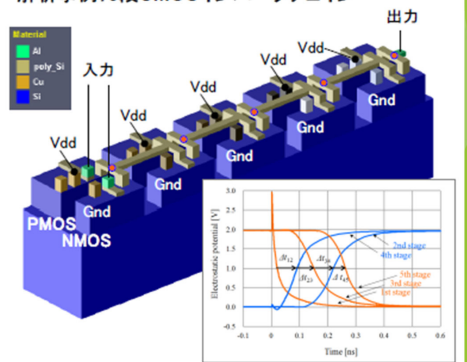
あらゆる産業分野でのDX化が進む中、その根幹をなすIoTに必要な半導体デバイス、センサー、通信機器への需要は今後も増加し続けます。また、政府が推進するグリーンイノベーションにおいて、経済産業省はNEDOプロジェクト「次世代デジタルインフラの構築」を立ち上げるなど、次世代パワー半導体や光エレクトロニクスの技術開発を支援しています。アドバンスソフトでは、これらの技術開発を担う、様々な機関の研究者、開発者の皆さまに、半導体デバイス解析、電磁波解析などの数値解析シミュレーションサービスをご提供しています。今回、アドバンスソフトではオンラインセミナーを開催し、当社が開発、販売するパッケージソフトである

◇ 半導体デバイス3次元TCADシステム【Advance/TCAD】

◇ 電磁波解析ソフトウェア【Advance/ParallelWave】

を中心に、半導体デバイス解析、電磁波解析、関連の数値解析シミュレーションサービスについてご紹介いたします。

解析事例:5段CMOSインバータチェイン



アドバンスソフトからの情報提供

1. セミナー 今後の予定
2. 当社最新情報
3. シミュレーションサービスについて

アドバンスソフトが開発・販売するソフトウェア

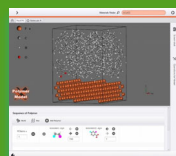
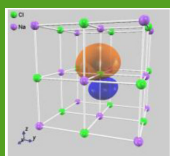
多種、多様なシミュレーションソフトウェアがお客様の課題解決をバックアップします。

お客様の課題

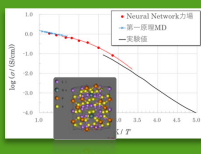
ナノシミュレーション

Advance/PHASE

Advance/NanoLabo

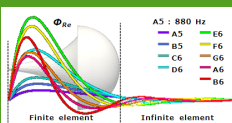


Advance/NeuralMD



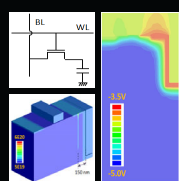
音響解析

Advance/FrontNoise



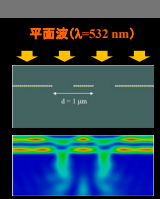
半導体デバイス解析

Advance/TCAD



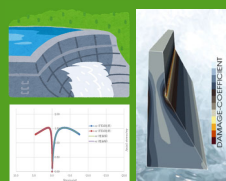
光/電磁波解析

Advance/ParalleWave



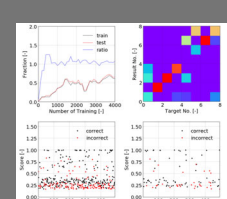
構造解析

Advance/FrontSTR



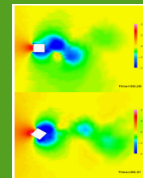
機械学習

Advance/iMacle

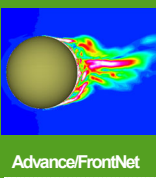


流体解析

Advance/FrontFlow/red



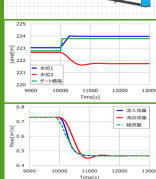
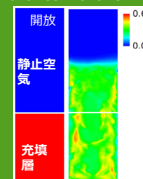
Advance/FOCUS-i



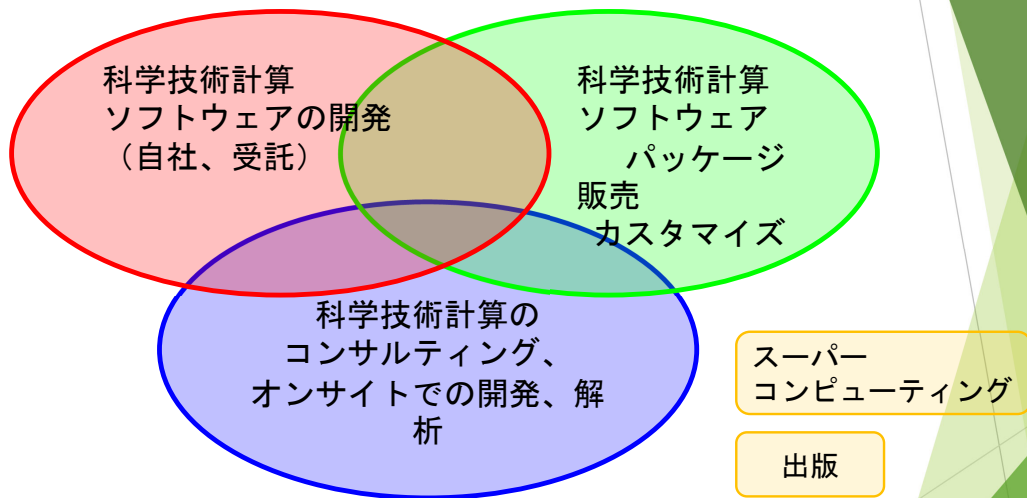
Advance/FrontNet



Advance/FrontFlow/M



アドバンスソフトがご提供するサービス



科学技術計算ソフトウェアの開発を基礎とした、
科学技術計算に関する様々なソリューションをご提供します。

パッケージソフトウェアの解析事例

解析事例Webページをリニューアルしました。

アドバンスソフト 事例集

検索

<http://case.advancesoft.jp>

- ソフトウェア名からだけでなく、産業分野別、解析分野別の検索が可能となりました。
- 最新の事例を掲載しました。今後も逐次最新事例を紹介します。

産業分野別	解析分野別
自動車・運輸	流体
材料・化学	爆発・燃焼
産業機械	構造
航空宇宙	振動音響
エレクトロニクス	ナノ・バイオ
建設土木	プリポスト
原子力	半導体デバイス
エネルギー	光・電磁波
環境・防災	

facebook、YouTubeでも関連記事を掲載中

<http://www.facebook.com/advancesoft.jp>



<http://www.youtube.com/user/advancesoft>



人材募集について

- アドバンスソフト株式会社では、シミュレーションに興味のある技術者の方を、広く求めています。
 - 修士 / 博士やポスドクの方
 - 既卒 / 新卒(2022秋・2023春・2023秋・2024春) / 中途採用
- ご興味のある方は、ぜひ弊社までお問合せください。
 - <http://www.advancesoft.jp/aboutus/recruit/>
 - TEL: 03-6826-3970
 - E-mail: recruit@advancesoft.jp

閉会

本日はお忙しい中、弊社オンラインセミナーへご参加いただき、誠にありがとうございました。



13



警告

このレポートに収録されている文章および内容については、ご自身のために役立つ用途に限定して無料配布しています。このレポートを、販売、オークション、その他の目的で利用するには、著作権者の許諾が必要になります。このレポートに含まれている内容を、その一部でも著作権者の許諾なしに、複製、改変、配布を行うことおよびインターネット上で提供する等により、一般へ送ることは法律によって固く禁止されています。