

3次元TCADシステム Advance/TCAD デバイスシミュレータへの 非平衡グリーン関数法(NEGF)の導入とナノシート構造への適用

大倉 康幸* 小田 嘉則* 小瀬村 大亮* 原田 昌紀* 小池 秀耀**

Implementation of non-equilibrium Green function method to Advance/TCAD device simulator and application of nano-sheet structure

Yasuyuki Ookura*, Yoshinori Oda*, Daisuke Kosemura*, Masanori Harada*, and Hideaki Koike**

Advance/TCAD デバイスシミュレータにおいて、最先端の研究段階である半導体テクノロジーノード 2nm の対応を考慮して非平衡グリーン関数(NEGF)法のソルバー版の開発を行い、ナノシート構造への適用を行った。

<https://doi.org/10.69290/j.001175-vol32>

Keywords: 半導体、デバイスシミュレータ、3次元計算、平衡グリーン関数法、ナノシート構造

1. はじめに

半導体テクノロジーノード 2nm においては、常温での電子の波長よりもデバイスのサイズが小さいため量子効果の取り込みが重要である。量子効果の取り込み方法の1つとして非平衡グリーン関数(NEGF)法[1]が知られている。グリーン関数とは微分方程式の境界条件・初期条件を満足する解であり、この場合、半導体中のキャリア（伝導電子または正孔）の状態に関する波動方程式の解を意味する。ソースからドレインにキャリアによる電流が流れているという状態が非平衡状態であり、その状態を解くのが非平衡グリーン関数法である。

アドバンスソフトでは Advance/TCAD デバイスシミュレータ [2] への非平衡グリーン関数(NEGF)法のソルバーの開発を行い、ナノシート構造への適用を行った。本報告はその概要を紹介する。

*アドバンスソフト株式会社 第1事業部

1st Computational Science and Engineering Group,
AdvanceSoft Corporation

**アドバンスソフト株式会社 代表取締役会長
Representative director and chairman, AdvanceSoft
Corporation

2. 非平衡グリーン関数ソルバーの仕様

非平衡グリーン関数(NEGF)法は既に多くの文献[1][3][4][5]で用いられているもので、輸送方向と垂直な方向については固有モードの基底を取るモード空間展開法を採用した。波動関数はソースドレインに垂直な2次元断面で有効質量近似により求め、それを x 方向 1 次元の非平衡グリーン関数を解くことによりソースドレインの電流を求める。

以下のアルゴリズムを用いる。このアルゴリズムは NEGF 法の一般的なものなのでここでは簡略化したものを示す。詳細にご関心がある方は引用文献を参照されたい。また、元来の Advance/TCAD デバイスシミュレータにある部分に関しては詳細を省略する。

デバイス制御ファイルを読み取る。
(Advance/TCAD デバイスシミュレータ用制御
ファイル)



デバイス構造を読み取る。(Advance/TCAD デバ
イスシミュレータ用構造ファイル)



NEGF を計算したい条件までは Advance/TCAD デバイスシミュレータ従来のドリフト拡散モデルの機能を用い、材質、不純物、電極の設定を行いポテンシャル、キャリア密度を計算により設定する。

↓ (ここからが NEGF の収束計算ループ)

与えられたポテンシャル分布を元に界面に垂直な面 (yz 面) のサブバンドを求める。

↓

電流の流れるソースからドレイン方向 (x 方向) 1 次元のグリーン関数を求める。

↓

求めたグリーン関数からキャリア密度を求める。

現状 n 型 MOS を想定しており電子のみ NEGF で解く。

↓

ポアソン方程式を解きポテンシャルを求める。
(収束計算するまで繰り返す)

各処理の詳細

・ yz 面のサブバンドの計算

与えられたポテンシャル分布を元に界面に垂直な各 yz 面において 2 次元の波動方程式の係数を設定する。

↓

各 yz 面でユーザーが指定した数だけサブバンドの固有値を求める。

・ グリーン関数の計算

各バレーについて与えられたエネルギー刻み幅による離散的なエネルギー値で以下の計算を行いエネルギー値に関してループで回す。

x 方向のハミルトニアンを設定する

グリーン関数は x 方向 1 次元のハミルトニアンの逆行列として与えられる。モード空間展開法は、波動関数が固有値を持つ波動関数の線形結合で与えられることから、近似的に x 方向に 1 次元的な系での波動関数と yz 面での

2 次元的な系での波動関数の積の線形結合で 3 次元的な波動関数を表す手法である。x 方向のハミルトニアンは yz 面で考慮する波動関数毎にハミルトニアンを考える必要がある。yz 面の波動関数は x 方向に正確には同一ではないために、隣り合う x 方向節点 (i_x と i_x+1) ごとに波動関数 (ϕ_{i_x} と ϕ_{i_x+1}) の yz 面での重なり積分 $\int \phi_{i_x} \phi_{i_x+1} dy dz$ を考える必要がある。すなわちハミルトニアンは x 方向の節点数 $\times$ yz 面の波動関数の数のブロック 3 重対角の行列の形となる。ハミルトニアンを離散的なエネルギーのループで回す。

↓

コンタクト (電極) の自己エネルギーを計算する。

キャリアの x 方向のエネルギー成分である。

↓

フォノンの自己エネルギーを計算する。

↓

グリーン関数を解く。

各 x 方向メッシュのハミルトニアンを連立した 3 重ブロック行列の LU 分解する。

↓

相関関数を計算。

相関関数は電極及びフォノンの自己エネルギーにグリーン関数の二乗を掛けたものにフェルミ関数を掛けたもの。

↓

求めたグリーン関数からキャリアの線密度、電流密度を求める。

求めたグリーン関数からキャリアの線密度、電流密度を求める。

各バレー各サブバンドのキャリアの線密度は x 方向メッシュでの相関関数にエネルギー刻み幅を掛けてエネルギーに関して総和を取ったもの。

・ キャリア密度計算

グリーン関数によって求めたキャリアの線密度に波動関数の二乗を掛けることにより

各 3 次元メッシュ点の体積当たりのキャリア密度となる。ポアソン方程式に使うキャリア密度として設定する。

・ポアソン方程式

現 Advance/TCAD デバイスシミュレータの実装に準じる。ポアソン方程式とグリーン関数の計算を自己無撞着に解く。

以上、ハミルトニアン及び自己エネルギー、相関関数、グリーン関数の式の詳細に関しては、文献[1]等を参照いただきたい。文献[1] が NEGF の初期の論文。1 次元共鳴トンネリングダイオードに適用している。電極の自己エネルギーもこの論文のものが使われている。文献[3]は多次元（2 次元）断面の波動関数で計算した最初の論文と思われる。文献[4]は実験データのあるナノデバイスを解析したという点で参考にした。文献[5]は NEGF とドリフト拡散モデルを連立した例として参考にした。

3. ナノシート構造への適用結果

今回、文献[6]で報告されている図 1(a)のような 3 シートのナノシート構造での NEGF 計算をターゲットとした。まず図 2(b)のような $5 \times 5 \text{ nm}$ のナノワイヤ構造での結果を示す。そして $20 \times 5 \text{ nm}$ のナノシート構造での結果を示す。最後に 3 段になった $5 \times 5 \text{ nm}$ のナノワイヤ構造での結果を示す。ゲート長 12 nm で計算した。メッシュサイズは NEGF で解く領域では 0.5 nm 間隔にした。その他は粗くしている。

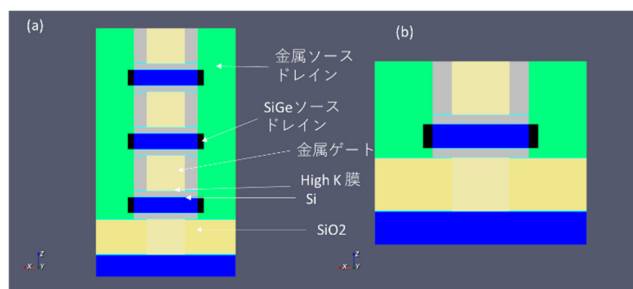


図 1 (a) NEGF 計算に用いたゲート構造、(b) 最初の NEGF 計算に用いた 1 ゲート構造

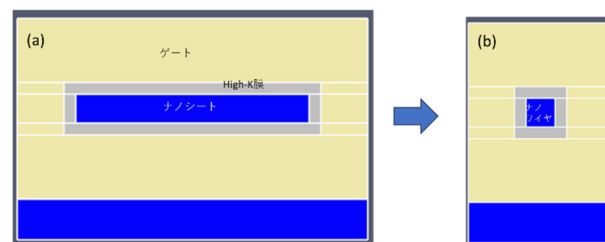
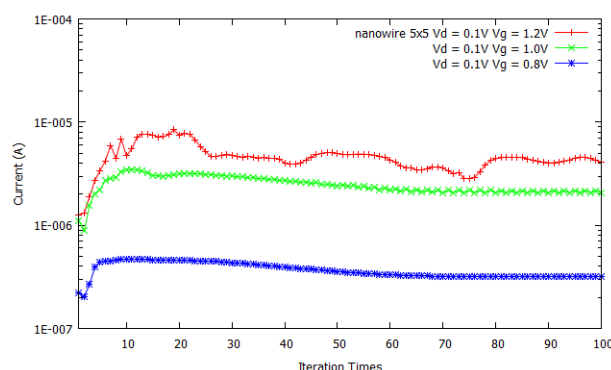
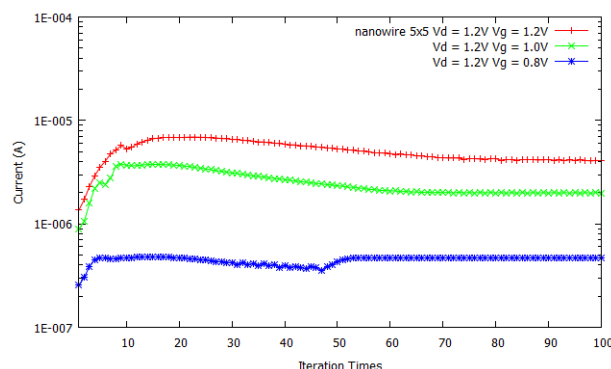


図 2 奥行方向断面図

(a) 文献通りのナノシート構造($5 \times 40 \text{ nm}$)の yz 断面、(b) 今回まず計算したナノワイヤ構造($5 \times 5 \text{ nm}$)の yz 断面



(a) $V_d = 0.1 \text{ V}$



(b) $V_d = 1.2 \text{ V}$

図 3 $5 \times 5 \text{ nm}$ のナノワイヤ構造での電流値の反復回数ごとの結果

図 (a)は $V_d 0.1 \text{ V}$ 、図 (b)は $V_d 1.2 \text{ V}$ 各線は上から $V_g = 1.2/1.0/0.8 \text{ V}$ 。

図 3 は $5 \times 5 \text{ nm}$ のナノワイヤ構造での電流値の Gummel 反復の反復回数ごとの結果である。Gummel 法はドリフト拡散モデルでポアソン方程式と電流連続方程式を逐次的に解く（デカップル）方法だが、ここではポアソン方程式と NEGF を 1 回ずつ計算するのを Gummel 反復 1 回と呼ぶ。NEGF の結果はポテンシャルに敏感であるため、Gummel 反復ごとの揺らぎが見られた。50 回程度

では安定している。ポアソン方程式を解いたときの電子密度の更新量は 10^{18}cm^{-3} でカットカットオフをしている。

計算時間は NEGF の計算は Gummel 反復 100 回アドバンスソフト社内計算サーバー (CPU @ 2.20GHz) で 10 分程度ではあるが、各電圧条件の初期値はドリフト拡散モデルで計算しており、それが大きな計算時間となる (後述)。y 方向を半分にした構造では 8480 ($=53 \times 8 \times 20$) 節点で計算し、 $V_d=1.2\text{V}$ $V_g=1.2\text{V}$ まで 0.1V 刻みで上げる (全 24 ステップ) のに同社内計算サーバーで 56 分程度を要した。半分でなく全体で計算した場合 15900 ($=53 \times 15 \times 20$) 節点で 373 分と約 6.7 倍要した。

行列解法には直接解く直接法と反復して解くため使用メモリが少なく済む反復法があるが、ポアソン方程式と電流連続式を線形一次元化した部分式を連立して解く Coupled 法の直接法ソルバーでないとこの例題は収束しなかった。直接法ソルバーでは行列を上三角行列下三角行列に分解 (LU 分解) を行うため、行列の帯 (xy 方向メッシュ数) の幅の二乗の計算量が必要となる。その場合 y 方向が対称な構造ではドリフト拡散モデルを半分で計算するのは有意義と考える。一方 NEGF の計算では固有値計算が半分で出来ないなので全体に広げて計算をする。

ゲート電極については、アルミニウム Al より仕事関数が 0.6V 低いチタンナイトライド TiN を使用した。ゲートが四方を取り囲む GAA (Gate All Around) 型では一般にしきい値が低くなるので仕事関数が Al より低い金属を用いるのが一般的であるからである。

図 4 は電流電圧特性を示す NEGF は Gummel 反復 51~100 回の平均値±標準偏差をエラーバーの形で示す。フォノン散乱を考慮しないバリスティック輸送の計算である。NEGF の結果は小さめ (1/4 程度) だった。波動関数の強度が半導体と絶縁膜が小さくなるという形でゲート酸化膜界面が空乏化 (いわゆる表面量子化) しているためだと考えられる。

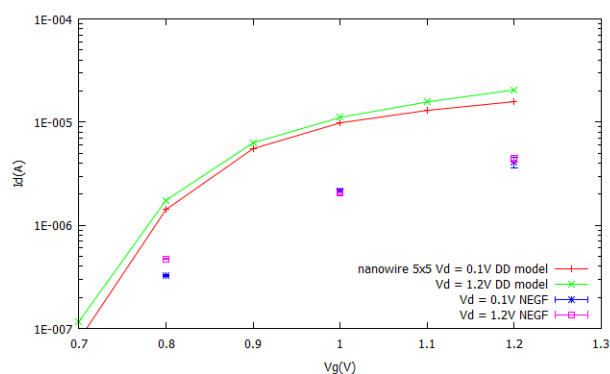


図 4 ナノワイヤ構造での電流電圧特性 $V_d = 0.1\text{V}$ 、及び $V_d = 1.2\text{V}$ ドリフト拡散モデル (実線)、NEGF (エラーバー付き点)

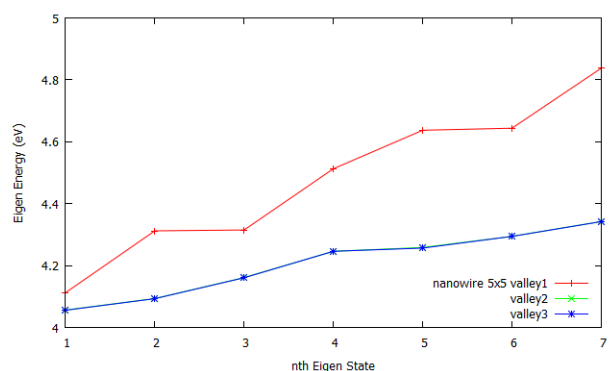
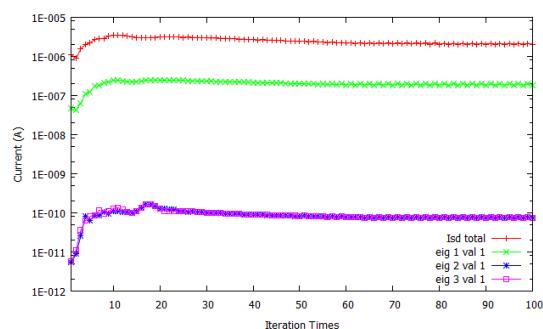
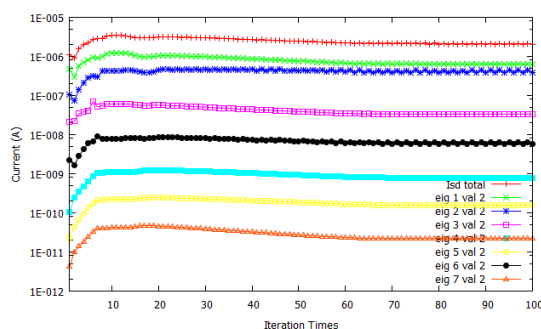


図 5 ナノワイヤ構造(5×5nm)のサブバンドの固有値エネルギー分布 (ゲートのソース端での yz 断面の波動関数の値)

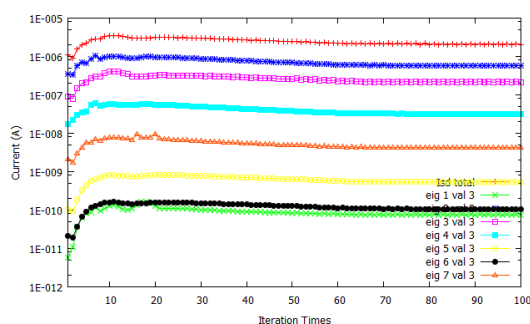
図 5 は各サブバンドの固有値エネルギーの分布である。横軸は固有値の順番で準位と呼ばれる。シリコンの場合、バンド構造に沿って複数のバレー (valley) が存在し、各バレーで異なる有効質量が定義される。x 方向に有効質量が大きいのが Valley 1、y 方向に有効質量が大きいのが Valley 2、z 方向に有効質量が大きいのが Valley 3 で 3 種類のハミルトニアンを解く。ナノワイヤ構造では y 方向 z 方向のチャンネル幅が共に 5nm なので Valley 2 と Valley 3 が重なっている。ゲートのソース端で $V_d 0.1\text{V}$ $V_g 1.0\text{V}$ で Gummel 反復回数 100 回目の値である。ゲートのソース端での値を示したが、チャンネル領域全体同様であった。また電圧条件を振っても似たような固有値分布が得られるので、この図を代表例として示した。



(a) Valley1



(b) Valley 2



(c) Valley3

図 6 各サブバンド毎の電流値の反復回数ごとの分布 $V_d = 0.1V$ $V_g = 1.0V$ 一番上の線が全電流値。

図 6 は各サブバンド毎の電流値の反復回数ごとの分布である。バレー毎に図を示した。一番上の曲線は全体の電流値、その他の線は、各準位の値で、小さいものほど、電流値が大きいので、上から第 1 (基底) 準位、第 2 準位、... が示されている。Valley 1 は最初の 3 準位を考えれば良い。第 4 準位以下はこのグラフに小さすぎて現れない。Valley 2, 3 は最初の 6 準位程度必要と思われる。Valley 1 ではエネルギーの近い準位 2, 3、Valley 2、3 は準位 4, 5 の電流が近接していた。ナノワイヤ構造では y 方向 z 方向のチャネル幅が共に $5nm$ なので Valley 2 と Valley 3 がほぼ重なっているが、ゲートからはずれたところは y 方向と z 方向に違い

があるので、少し分布がずれている。

サブバンド毎の電流値に影響するサブバンド固有値の密度は固有値エネルギーと Fermi エネルギーの差の関数で、常温では $60mV$ 固有値エネルギーが高いと約 1 桁密度が小さくなるので、4 桁小さい $240mV$ 程度の固有値エネルギー範囲のサブバンドを考えれば良いと思われる。 yz 面の有効質量が小さい Valley 1 では第 3 準位まで、Valley 2 及び 3 では第 6 準位程度まで考慮するのが適当と思われる。

次は奥行き (y 方向) を延ばしシート状にした場合を示す。 y 方向 $20nm$ の場合を示す。半導体デバイスにおいて、ワイヤーは細長い線状の構造を、シートは薄いが平らな構造を指すことが多く、本報告もそれに従った。

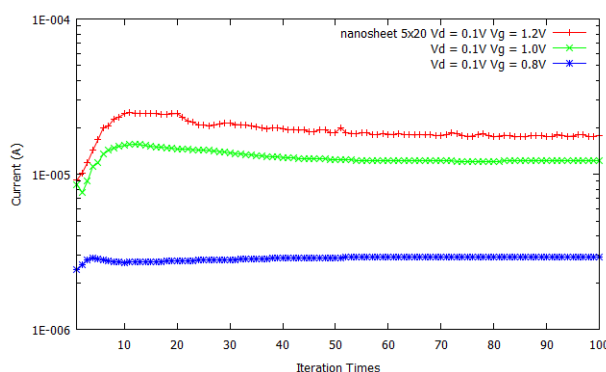
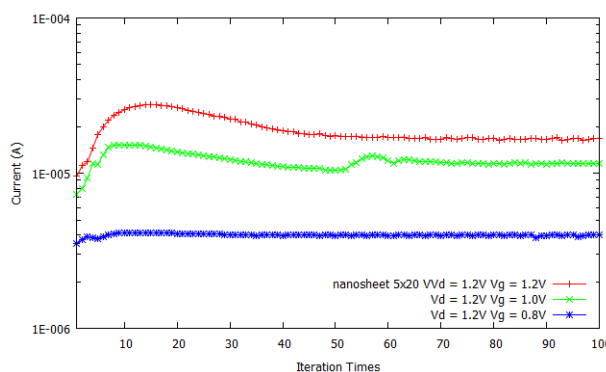
(a) $V_d = 0.1V$ (b) $V_d = 1.2V$

図 7 ナノシート構造 $20 \times 5nm$ での電流値の反復回数依存性

図(a)は $V_d 0.1V$ 、図(b)は $V_d 1.2V$ 各線は上から $V_g = 1.2/1.0/0.8V$ 。

図 7 は電流値の反復回数ごとの依存性を示す。ナノワイヤ構造に比べて揺らぎが若干大き

くなっていることが分かった。

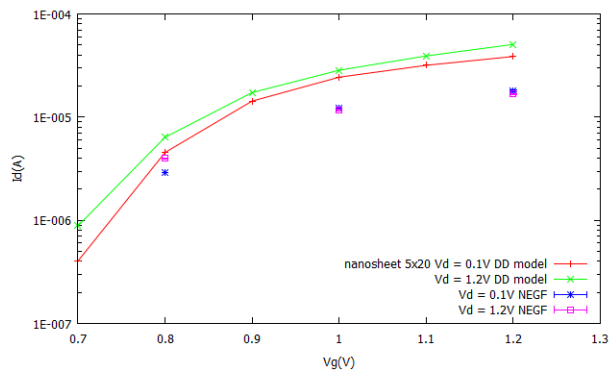


図 8 ナノシート構造での電流電圧特性 V_d 0.1V、及び V_d 1.2V ドリフト拡散モデル (実線)、NEGF (エラーバー付き点)

図 8 はナノシート構造での電流電圧特性である。ドリフト拡散モデルとの電流値の差が小さくなった、ナノワイヤでは 1/4 程度であったのが 1/2 となっており y 方向の量子化の影響が小さくなり z 方向の量子化のみが効いているためと考える。

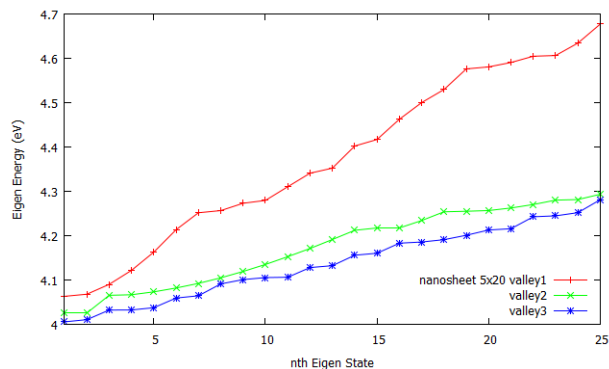
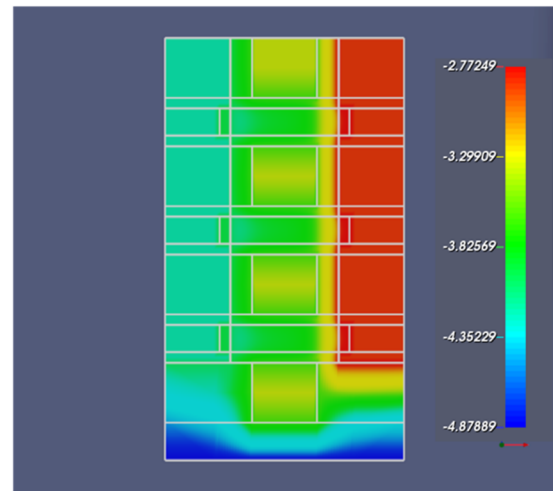
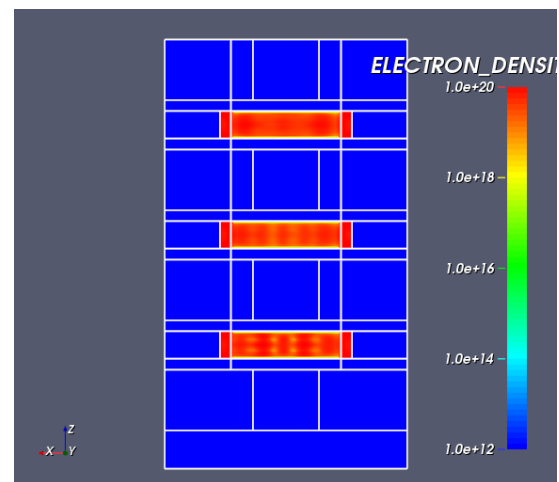


図 9 ナノシート構造(20×5nm)の固有値エネルギー分布 (ゲートのソース端での yz 断面の波動関数の値)

図 9 はナノシート構造での固有値エネルギーの分布を示す。奥行方向を増やすと固有値のエネルギー間隔が狭くまりがそれだけ考慮すべき固有値の数が増える。 y 方向幅が 20nm であれば 25 個程度の固有値が必要と思われる。今回 25 個の固有値で計算した。



(a) ポテンシャル分布



(b) 電子密度分布

図 10 3層構造での計算したときの(a) ポテンシャル分布 (b) 電子密度分布 $V_d = V_g = 1.2 \text{ V}$

最後にチャンネルが 3 層積層した構造 (図 10) の例を示す。ドレインが右側になっている。5×5 nm のナノワイヤ構造 ゲート長 12nm である。波動関数の強度が半導体と絶縁膜が小さくなるという形でいわゆる表面量子化がはいっているため、電子密度は界面での値が小さくなっている。

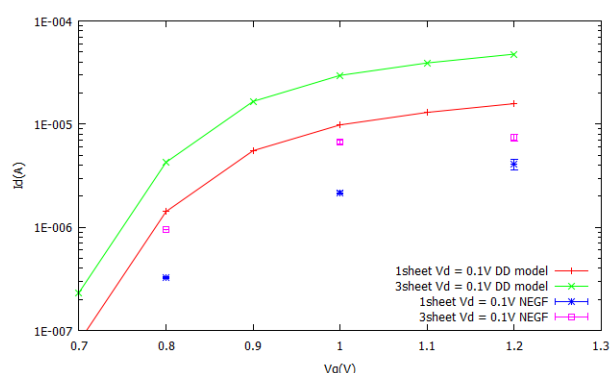
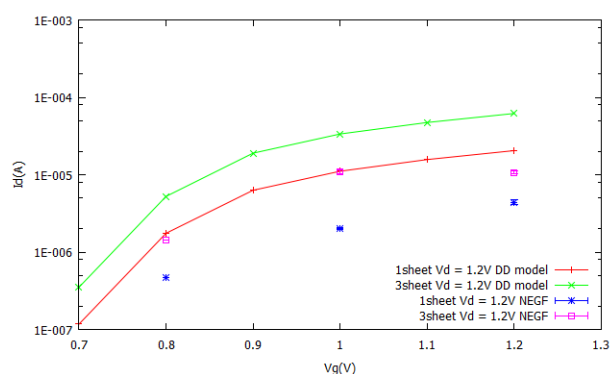
(a) $V_d = 0.1V$ (b) $V_d = 1.2V$

図 11 3 シート構造の電流電圧特性

実線 ドリフト拡散モデル エラーバー付きの点 NEGF モデル
3 シート構造 (大きい方) と 1 シート構造 (小さい方) を示す。

図 11 は電流電圧特性である。この同じチャネルが 1 層の場合と 3 層の場合を並べて示す。ほぼ 3 倍の特性が出ている。

メッシュ幅は、多くの文献を見ると、格子定数程度、 0.5nm 以下程度であるので非平衡グリーン関数で解く領域は 0.5nm 間隔で切った。

しかしながら実験で発表されているナノシートレベルのサイズではメッシュ数が大きくポアソン方程式を解く時に共役勾配法で解けず直接法 (完全三角分解) が必要であった。

そのために、今回の構造が奥行方向について対称であることに着目にポアソン方程式を解く構造は奥行方向半分にした。

直接法では、奥行方向メッシュ数の 2 乗の計算量となるために計算量削減となった。今回示したものは、ナノワイヤ構造 ($5 \times 5\text{nm}$) 1 層構造 8480 メッシュ、ナノシート構造 ($20 \times 5\text{nm}$) 1 層構

造 24380 メッシュ、ナノワイヤ構造 ($5 \times 5\text{nm}$) 3 層構造 22048 メッシュで計算した。

文献[6]ではナノシート構造の奥行は 40nm となり、本報告のタイトルもナノシート構造ではあるが、シートの幅が大きくなると固有値の間隔が更に小さくなり計算も不安定になるため、今回はまずは奥行の小さいナノシート構造 ($20 \times 5\text{nm}$) とナノワイヤ構造 ($5 \times 5\text{nm}$) に絞って報告をした。またフォノン散乱を含めた場合に計算の安定性に未だ懸念があり今回はまずはフォノン散乱を含めない場合に関して報告した。

4. まとめ

半導体テクノロジーノード 2nm においては、常温での電子の波長よりもデバイスのサイズが小さいため量子効果の取り込みが重要である。そこで非平衡グリーン関数 (NEGF) 法のソルバーの開発を行った。

既存のアドバンスデバイスシミュレータをベースとして開発した。NEGF ではハミルトニアンを解くために、メッシュ間隔を電子の波長より十分狭く取る必要がある。そのために NEGF で解く部分は $x/y/z$ 方向ともメッシュ数が増えるため、奥行方向が対称構造の場合、3 次元ポアソン方程式を解く場合は半分のメッシュで計算出来るモデルを追加した。

Green 関数は一粒子ハミルトニアンの逆行列であり、ソースドレイン間の非対角成分を透過確率として求めている。そのためにソースドレイン間のポテンシャルに敏感に変化するためポアソン方程式を解く Gummel 反復の平均値として求めた。

奥行サイズを変えてナノシート構造を計算した。奥行サイズを大きくすると、計算は可能であるが、必要な固有値は増し、計算量が増大する。また実デバイスでは複数シート構造があるので複数シート構造の計算をして結果を示した。

参考文献

- [1] S. Datta, "Nanoscale device modeling: the Green's function method" Superlattices and

- Microstructures, 28, pp. 253-278 (2000)
- [2] 山口憲、原田昌紀、桑原匠史、大倉康幸、
「デバイスシミュレーション」(2015) アド
バンスシミュレーション Vol.21
- [3] E. Polizzi, N. Ben Abdallah, "Self-consistent three-
dimensional models for quantum ballistic transport
in open systems", Physical Review B 66, 245301
(2002)
- [4] Hasanur R. Khan, Denis Mamaluy, Member, and
Dragica Vasileska, "Quantum Transport
Simulation of Experimentally Fabricated Nano-
FinFET" IEEE Trans Electron Devices, 54, pp.
784-796 (2007)
- [5] Salim Berrada, · Hamilton Carrillo-Nunez, ·
Jaehyun Lee, · Cristina Medina-Bailon, · Tapas
Dutta1 · Oves Badami, · Fikru Adamu-Lema, ·
Vasanthan Thirunavukkarasu1, · Vihar Georgiev, ·
Asen Asenov. "Nano-electronic Simulation
Software (NESS): a flexible nano-device
simulation platform", Journal of Computational
Electronics 19 pp. 1031–1046 (2020)
- [6] J. Zhang et al., IEDM 2019, 11-6

※ 技術情報誌アドバンスシミュレーションは、
それぞれの文献タイトルの下に記載した DOI
から、PDF ファイル（カラー版）がダウンロー
ドできます。また、本雑誌に記載された文献は、
発行後に、JDREAMIII（日本最大級の科学技術
文献情報データベース）に登録されます。