

氏名(本籍)	くるすたかし 来栖貴史(東京都)		
学位の種類	博士(工学)		
学位記番号	博甲第3853号		
学位授与年月日	平成17年9月30日		
学位授与の要件	学位規則第4条第1項該当		
審査研究科	数理物質科学研究科		
学位論文題目	半古典的モンテカルロ法による極微細半導体素子における電子輸送についての研究		
主査	筑波大学教授	理学博士	名取研二
副査	筑波大学教授	工学博士	重川秀実
副査	筑波大学教授	工学博士	喜多英治
副査	筑波大学助教授	Ph. D.	佐野伸行
副査	東京大学大学院教授	工学博士	鳥海明

論文の内容の要旨

論文は、極微細半導体素子における電子輸送を、半古典的モンテカルロ法により解析したものである。前半は、不純物原子の作るポテンシャル井戸と相互作用するキャリアの輸送の解析がテーマであり、後半は、弾道輸送ないし準弾道輸送の状況にある素子の動作機構の解析に焦点を当てている。

半導体の半古典的モンテカルロ計算では、半導体内のキャリアの運動を、電界による連続的・古典的な加速運動(ドリフト運動という)と、不連続な量子力学的状態遷移からなる、不純物ポテンシャルやフォノンなどとの衝突・散乱という2種の過程に分ける。多数のキャリアを同時に運動させ、偶発的な現象にモンテカルロ手法を取り入れて、個々のキャリアの動きを追跡シミュレートし、得られるキャリア分布関数からアンサンブル・ミーンとして半導体物性や素子特性を算出する。

従来、不純物散乱は一定の遷移確率が空間的に一様に分布するとして、上記の散乱のひとつとして扱われてきた。しかし、素子の微細化で不純物原子の分布の離散性が問題となるようになり、不純物ポテンシャルを空間的に配置し、その中でキャリアのドリフト運動が考慮されるようになった(いわゆる分子動力学手法)。しかし、古典的なドリフト運動はポテンシャル井戸内の量子力学的なエネルギー・レベルを扱えないため、キャリアがフォノンを発生して不純物井戸の中心に無限に落ち込むと言う困難を生じてきた。

本研究の前半では、この問題を、不純物ポテンシャルをデバイ長により long range 成分と short range 成分とに分割し、深い井戸をもつ short range 成分の寄与は散乱ポテンシャルとして遷移確率を用いて取り入れ、なだらかな空間的起伏のみの long range 成分は、ドリフト運動への寄与として取り込む方法を与えた。この方法により上記の不安定性は除去され、キャリアの移動度などの評価が可能となった。long range のポテンシャルの起伏の存在はキャリアの運動を既定の経路からそれさせ、スムーズな運動を妨げる働きをする。このため、キャリアの移動度はその存在により劣化する傾向を示す。デバイスの極微細化傾向に沿って、不純物濃度を増加させると、long range 成分の変動の振幅や空間周波数の増大が見られ、それが移動度劣化の激化に繋がることとなる。従来のモデルによる計算値は、実測値に比べ過大な移動度を与えていたが、本研究の結果はそれを実測値の方向に近づける要素のひとつと考えられる。

ついで、本モデルを用いて、不純物ポテンシャルによるキャリアの捕獲過程の解析がなされた。キャリアは、ポテンシャル井戸を通過中にフォノンを放出してエネルギーを失い、井戸中に落ち込む。その後、フォノンを吸収したキャリアは捕獲を脱して井戸から離れ、再度自由キャリアとなる。キャリアは運動中これらの過程を繰り返すが、結果的に熱エネルギーより大き目のエネルギーを失ったキャリアは、それを取戻して自由電子に復帰する確率が極めて小さく、いわゆる不純物に捕獲されたキャリアとなる。温度依存性を計算し、絶対値がやや小さいながら、実測値と定性的な一致が得られている。

次に、キャリア輸送に関する第2のトピックとして極微細素子中のキャリアの弾道輸送を解析している。素子の微細化の大きな流れの中で、キャリア輸送素子も微細化の一途をたどり、MOSFETなどの素子のサイズは、この先10年くらいで10nmを切ると予想されている。常温におけるキャリアの平均自由行程が数nmから数10nmとされているので、今後、素子のサイズが平均自由行程と同程度、ないし平均自由行程以下の大きさになっていく。従来、素子中のキャリアの輸送は、移動度モデルにより解析されてきた。移動度モデルでは、キャリアが十分な回数の散乱を受け、その速度が電界に比例する平衡速度になることが前提とされる。しかし、素子サイズが平均自由行程と同程度、ないしそれ以下になると、キャリアは少数回の散乱で、平衡に達しない速度のまま、ないし、場合によっては無散乱のまま、電極から電極まで走りぬける事態となる。いわゆる、準弾道輸送ないし弾道輸送の領域である。本研究では、このような極微細素子のキャリア輸送について、特にドレインと呼ばれるキャリア排出用電極内の現象が、キャリア輸送に与える影響を解析した。この解析に、n-i-n構造と呼ばれる、電極を表す二つのn領域の間に、素子本体を現すチャンネルと呼ばれる真性半導体層(i層)をはさんだ構造を想定し、それぞれソース、ドレインと呼ばれる電極間に電圧を印加して、流れるキャリアの流れを解析している。この構造は、MOSFETなど実際の素子の構成要素であり、素子特性の解析によく用いられている。本研究では上の趣旨にかんがみ、チャンネル部分における散乱を無視して弾道輸送を想定している。ドレイン内の散乱体を各種に仮定し、モンテカルロ計算を実行した。

① 先ず、ドレイン内の散乱も無視して、ソースから発したキャリアが無散乱で電極に吸収される場合を考察した。チャンネル内のキャリアの平均速度はソース端からドレインに向かうにつれて増大し、ドレイン端にピークを持ち、ドレイン内に入ると電極中の多量の熱平衡キャリアと平均されて低レベルに下がった。

② 次いで、ドレイン内で弾性散乱のみを考慮した。この場合は、平均速度のピークはほぼチャンネル中央に移り、その高さも①に比べて半減した。これに応じて、素子電流も①の場合に比べて大きく低下した。解析の結果、ドレイン内の弾性散乱によりキャリアの運動が乱雑化し、一部ソースに向かう速度を持つものがチャンネルに逆流してソースからドレインに向かう平均速度を劣化させ、一部は無散乱のチャンネルを横切ってソースにまで達して、電流値の低下をもたらしたことが判明した。

③ 更に、ドレイン内の、主として光学フォノン放出からなる非弾性散乱も加え合わせた結果を見ると、平均速度のピークはややドレイン側に戻り、ピーク高も①の場合に向かって大きく回復している。これは、非弾性散乱がキャリアのエネルギー緩和を促進し、ドレインからチャンネルに逆流するキャリアのエネルギーを低下させたことに起因する。逆流キャリアのエネルギーおよび速度は小さくなり、元のソースからドレインに向かう平均速度の増大をもたらすと共に、ソースに向かって立ち上がるポテンシャル・バリアを超えてソースに戻るキャリアが大幅に減少して、素子電流の回復を引き起こしたものである。これらの解析から明らかとなったことは、(1) 弾道輸送状態に近い極微細素子の特性には、ドレイン電極内のキャリア散乱による、チャンネル領域へのキャリアのリバウンドが大きな影響を与えること、(2) 従来よりキャリアの弾性散乱および非弾性散乱とともに、キャリア輸送を阻害する原因として同列に論じられてきたが、実はキャリア輸送を大きく阻害するのは弾性散乱であり、エネルギー緩和を伴う非弾性散乱は、状況によりトータルなキャリア輸送を促進して電流の増大をもたらすこと、である。

最後に、素子構造に工夫を加え、キャリアのドレイン電極からのリバウンドを抑制する可能性を検討した。チャンネル部分の幅を、酸化膜などポテンシャル・バリアを用いて絞り、ドレイン電極の幅がチャンネル部分の幅より大きいように構成された構造を用いて、キャリアのリバウンドおよび電流値を解析した。その結果、チャンネル幅を弾性散乱の平均自由行程程度より小さく絞ると、キャリアのチャンネルへのリバウンドが大きく抑制され、チャンネル幅で規格化された電流値の増大が観察された。また、チャンネル領域を大きなドレイン電極に複数個を並列に接続させた構造の素子では、各チャンネルが独立な寄与をするよう、チャンネル間の間隔を少なくとも非弾性散乱の平均自由行程程度の距離だけ離すことが有効であることも示された。

審 査 の 結 果 の 要 旨

全体を通した著者の発表の後、質疑を通じて研究内容の詳細が明らかにされた。

前半で提案している、不純物ポテンシャルを long range と short range とに分割して、分子動力学手法を取り入れたモンテカルロ計算に導入する方法は、個々の不純物配置などが問題となる極微細な素子の解析に有効と考えられ、実用上の意義が評価される。実際、次のトピックである不純物ポテンシャルのキャリア捕獲は、従来はモンテカルロによる取り扱いが困難であった現象が、解析できるようになったよい例である。後半のドレイン電極からのキャリアのリバウンドの解析は、ランダウアーへの公式が理想に近い系の解析に大きな威力を発揮してきた状況に対して、現実の素子には不可避な“理想からのずれ”の部分が内在することを指摘し、極微細素子におけるその重要性を主張している点にオリジナリティが認められる。また、非弾性散乱がデバイス動作に対して弾性散乱と異なる寄与をすること、関連してエネルギー緩和がデバイス性能を向上させる方向に機能することの指摘も、デバイス物理の面で新しい指摘である。本研究の基本的枠組みである、半古典的モンテカルロ計算の適用限界や、その先にある量子輸送理論との接続などの議論は十分に尽くされていないが、その部分は多くの問題を抱える未知の分野であり、今後の研究の発展に期待する。

よって、著者は博士（工学）の学位を受けるに十分な資格を有するものと認める。