

研究種目：基盤研究 (B)

研究期間：2006～2008

課題番号：18360160

研究課題名 (和文) ナノスケール素子における高濃度電子輸送の 3 次元粒子シミュレーションによる研究

研究課題名 (英文) Study of High-Density Electron Transport by Three-Dimensional Particle-Based Simulations under Nano-Scale Devices

研究代表者

佐野 伸行 (SANO NOBUYUKI)

筑波大学・大学院数理物質科学研究科・教授

研究者番号：90282334

研究成果の概要：

電子間および電子不純物間クーロン相互作用を 3 次元粒子シミュレーションに高精度に導入したうえで、現実的なデバイス構造のデバイス・シミュレータを構築した。高濃度ソースおよびドレインでの集団運動 (プラズマ波の励起)、電子の縮退状態、バンドテール効果とホットエレクトロン化、が正しくシミュレートできていること検証することで、ソース/ドレイン領域まで含めた構造でのモンテカルロ・シミュレータの動作の正当性を検証した。

交付額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2006 年度	10,800,000	3,240,000	14,040,000
2007 年度	1,800,000	540,000	2,340,000
2008 年度	1,900,000	570,000	2,470,000
年度			
年度			
総計	14,500,000	4,350,000	18,850,000

研究分野：工学

科研費の分科・細目：電気電子工学、電子デバイス・電子機器

キーワード：電子デバイス・集積回路

## 1. 研究開始当初の背景

ナノスケール素子では、チャンネル領域の不純物間平均距離や電子の平均自由行程がゲート長と同程度であることから、局在した不純物による散乱や電子間相互作用により、チャンネル電子の走行パスが素子ごとにばらついて、素子の特性揺らぎを誘発することが懸念されている。しかしながら、クーロンポテンシャルの長距離相関を本研究で到達した精度で組み込んで解析を進めていたのは、本分野の研究で世界を牽引している米国 IBM のグループのみであった。しかしながら、彼

らのシミュレーションは 2 次元かつエネルギー散逸のあるフォノン散乱を含めたシミュレーションであるため、シミュレーション上でエネルギー保存が厳密に守られているか疑問があるうえに、散乱が含まれるために高濃度領域での電子エネルギーの増大が何に起因するのかが明確になっていなかった。その結果、高濃度特有の効果 (電子エネルギーのホットエレクトロン化) が電子輸送において顕在化する可能性やデバイス特性への定量的な影響が不明のままであった。

## 2. 研究の目的

長距離クーロン力を正確に組み込んだ電子輸送の3次元粒子シミュレータの構築とナノスケール素子構造のもとのデバイスシミュレーションによる素子特性解析を行うことを目的とする。具体的な到達目標は、以下の3点である。

- (1) 局在した不純物および電子によるクーロンポテンシャルの長距離成分を3次元粒子シミュレーションに厳密に組み込み、理論解析との比較からシミュレータの精度を検証する。そのうえで、高濃度領域で発現する特異な電子のホットエレクトロン化を定量的に考察する。
- (2) 空間的にさまざまに離散分布する不純物のもとで、不純物の離散性の電子輸送への影響を定量的に検討する。
- (3) 高精度化したシミュレータに典型的なデバイス (MOSFET) 構造を導入し、高濃度のソース/ドレイン領域での電子輸送の機構の解明とホットエレクトロン化による素子特性への影響を明らかにする。

## 3. 研究の方法

- (1) 当該グループで構築した2次元粒子シミュレータを3次元化して拡張する。そのうえで、フォノン散乱等のエネルギー散逸過程を外して、電子間クーロン相互作用のみで熱平衡状態にあるエネルギー保存系の3次元粒子シミュレーションを実行し、全系のエネルギー保存を長時間にわたって保持させるためのシミュレーションパラメータを明らかにする。そのうえで、電子系に励起されるプラズマ振動のスペクトル強度、励起波の分散関係、ランダウ減衰率についての理論的予測と比較検討し、シミュレーションの精度について考察する。
- (2) 高濃度領域での電子のホットエレクトロン化の物理機構について検討する。ホットエレクトロン化は、電子間クーロンポテンシャルの長距離成分によるバンド端の揺らぎが主原因と考えられる。これは、時間に依存する動的効果であることを除けば、基板不純物濃度の空間的揺らぎによるバンドテリング (band-tailing) 効果と同様に考えることができる。フォノン散乱等の短距離散乱過程によるエネルギー散逸効果を導入する。そのうえで、フォノン散乱を加えた状態でも同様のホットエレクトロン化が観測されると予想される。
- (3) 散逸まで含めた3次元粒子シミュレータに、ナノスケールの素子構造 (MOSFET) を導入する。高濃度にドーピングされているソース/ドレイン (S/D) 領域での電子のホットエレクトロン化を検証する。そのうえで、S/D 領域

での電子のホットエレクトロン化による素子特性への影響を明らかにする

## 4. 研究成果

(1) 数値計算上取り扱いが困難なクーロンポテンシャルの長距離成分を3次元粒子シミュレーションに厳密に導入、局在した離散不純物による新たな散乱モデルの構築を行った。バルク形状のもとでは、構築した散乱モデルが従来の散乱モデルの結果を再現し得ることで、モデルの正当性を検証した。そのうえで、全ての短距離散乱に縮退効果を組み込むことで、縮退状態のシミュレーションを可能にし、低濃度から高濃度領域までパラメータを用いることなく、電子移動度の不純物濃度依存性を再現できることを示した。この結果は、正確なクーロン相互作用の3次元粒子シミュレーションへの組み込みに成功したことを意味する。クーロン相互作用の導入は、モンテカルロシミュレーションにおける長年にわたる未解決問題であり、世界的に見ても3次元シミュレーションで成功した例は無く、当該研究が唯一のものである。その意味で、クーロン相互作用に関係する種々の学術的な新しい知見につながり得るシミュレータを構築できた。

(2) 一様なゼリー状不純物や、離散的なイオン化不純物をさまざまに空間的に分布させることによる電子輸送への影響を定量的に解析した。イオン化不純物の空間的な局在性を考慮したデバイス・シミュレータは現在のところ存在しないことから、本研究成果は、デバイス特性揺らぎを初めて定量的に評価し得る粒子モンテカルロ・シミュレータと言える。

(3) 現実的なデバイス構造 (ダブルゲート MOSFET) を3次元粒子シミュレーションに導入し、ソースおよびドレイン領域での高濃度電子輸送シミュレーションが正しく動作することを検証した。具体的には、デバイスが動作している状態でソースおよびドレインでの集団運動 (プラズマ波の励起)、電子の縮退状態、バンドテール効果とそれによるホットエレクトロン化、が正しくシミュレートできていることを世界で初めて検証した。従来のシミュレータでは、クーロン相互作用の導入が不正確であったことから、高濃度の領域の電子状態を正しくシミュレートできているかどうかは不明であった。当該研究で初めて縮退した電子状態のシミュレートが可能となり、かつこのような縮退状態がデバイス特性に大きな影響を及ぼし得ることを明らかにした。当該研究の方向を発展させて、さらに詳細な定量的なシミュレーション解析がかなり重要となることは明らかである。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 6 件)

- ① T.Fukui, T.Uechi, and N.Sano, "Three-dimensional Monte Carlo Simulation of Electron Transport in Si Including Full Coulomb Interaction," *Appl. Phys. Exp.*, 1, pp.5107\_1-3 (2008), 査読有
- ② S.Toriyama and N.Sano, "Schottky Barrier MOSFETs as Resonant Tunneling Devices," *J. Comp. Electron.*, 7, pp.471-474 (2008), 査読有
- ③ T.Uechi, T.Fukui, and N.Sano, "3D Monte Carlo Analysis of potential Fluctuations under High Electron Concentrations," *J. Comp. Electron.*, 7, pp.240-243 (2008), 査読有
- ④ S.Sato and N.Sano, "Consistency of Boundary Conditions in Nonequilibrium Green's Function Simulations," *J. Comp. Electron.*, 7, pp.301-304 (2008), 査読有
- ⑤ T.Uechi, T.Fukui, and N.Sano, "3D Monte Carlo Simulations including Full Coulomb Interaction under High Electron Concentration Regimes," *Phys.stat.sol.(c)*, 5, pp.102-106 (2008), 査読有
- ⑥ 佐野伸行, "ナノスケール半導体構造における準弾道電子輸送", 応用物理学会誌 10月号, pp.1135-1141 (応用物理学会、2007), 査読有

[学会発表] (計 13 件)

- ① N.Sano, "Impact of the Coulomb Interaction on Nano-scale Device Characteristics: A Monte Carlo Study", IEEE EDS Mini-colloquium for Nano CMOS and Nanowire, 東工大、横浜市, 2009年2月21日).
- ② N.Sano, T.Uechi and T.Fukui, "3D Monte Carlo Simulations of Nano-scale Devices: Impact of Coulomb Interaction on Device Characteristics", Technical Seminar, International Conference on Solid State Materials and Devices (SSDM-2008), Tsukuba, September 23, 2008.
- ③ S.Toriyama, K.Matsuzawa, and N.Sano, "Impacts of Random Dopant Fluctuation on Transient Characteristics in CMOS Inverters: A Device Simulation Study," International Conference on Solid State Materials and Devices

(SSDM-2008), Tsukuba, September 24-26, 2008 [Proc. SSDM, pp.892-893 (2008)].

- ④ T.Yamada and N.Sano, "Effects of Gate-Edge Metamorphoses (GEM) on Device Characteristics of Scaled MOSFETs," 2007 International Semiconductor Device Research Symposium (ISDRS 2007), College Park, December 12-14, 2007 [Proc. ISDRS, p.WP8-01 (2007)].
- ⑤ T.Uechi, T.Fukui, and N.Sano, "3D Monte Carlo Analysis of potential Fluctuations under High Electron Concentrations," International Workshop on Computational Electronics (IWCE-12), Amherst, October 8-10, 2007 [Proc. IWCE, pp.128-129 (2007)].
- ⑥ S.Toriyama and N.Sano, "Scaling Dependence of Electron Transport in Nano-scale Schottky Barrier MOSFETs," International Workshop on Computational Electronics (IWCE-12), Amherst, October 8-10, 2007 [Proc. IWCE, pp.141-142 (2007)].
- ⑦ T.Fukui, T.Uechi, and N.Sano, "Electron Transport Simulations Including Full Coulomb Interaction in Si," International Workshop on Computational Electronics (IWCE-12), Amherst, October 8-10, 2007 [Proc. IWCE, pp.102-103 (2007)].
- ⑧ S.Sato, H.Kusaka, and N.Sano, "Consistency of Boundary Conditions in Nonequilibrium Green's Function Simulations," International Workshop on Computational Electronics (IWCE-12), Amherst, October 8-10, 2007 [Proc. IWCE, pp.205-206 (2007)].
- ⑨ S.Toriyama and N.Sano, "Schottky Barrier MOSFETs as Resonant Tunneling Devices," International Conference on Solid State Materials and Devices (SSDM-2007), Tsukuba, September 19-21, 2007 [Proc. SSDM, pp.48-49 (2007)].
- ⑩ T.Uechi, T.Fukui, and N.Sano, "3D Monte Carlo Simulations including Full Coulomb Interaction under High Electron Concentration Regimes," 15-th International Conference on Nonequilibrium Carrier Transport in Semiconductors (HCIS-15), Tokyo, July 23-27, 2007 [Proc. HCIS-15, p.89 (2007)].
- ⑪ H.Kusaka and N.Sano, "Detailed Balance in Quasi-Ballistic Electron Transport under Nanoscale Device Structures," International Conference on Solid

State Materials and Devices  
(SSDM-2006), Yokohama, September  
13-15, 2006 [Proc. SSDM, pp.356-357  
(2006)].

- ⑫ S. Toriyama, D. Hagishima, K. Matsuzawa,  
and N. Sano, "Device Simulation of  
Random Dopant Effects in Ultra- small  
MOSFETs Based on Advanced Physical  
Models," International Conference on  
Simulation of Semiconductor Processes  
and Devices (SISPAD-2006), Montley,  
September 6-8, 2006 [Proc. SISPAD,  
pp. 145-146 (2006)].
- ⑬ T. Uechi and N. Sano, "Hot Electrons  
Associated with the Long-Range Coulomb  
Interaction under the High-Density  
Regime," 2006 VLSI-TSA Technology  
Symposium, Hsinshu, Taiwan, April  
24-26, 2006 [Proc. 2006 VLSI-TSA,  
pp. 141-142 (2006)].

[その他]

ホームページ

<http://hermes.esys.tsukuba.ac.jp/>

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

佐野 伸行 (SANO NOBUYUKI)

筑波大学・大学院数理物質科学研究科・教授  
研究者番号：90282334

### (2) 研究協力者

上地 忠良 (筑波大学・大学院数理物質科学  
研究科・博士後期課程3年)

福井 貴之 (筑波大学・大学院数理物質科学  
研究科・博士前期課程2年)

中西 洸平 (筑波大学・大学院数理物質科学  
研究科・博士前期課程1年)