

半導体の量子移流拡散モデルを解析するための 数値解析スキーム

野田 佳克 (東京工業大学 情報理工学研究科)

2010年度第7回数理学談話会, 2011/1/27

1 序論

電子工学の分野では、半導体デバイスの設計を行う際に計算機によるシミュレーションが広く用いられている。様々な状況に応じたデバイスのシミュレーションを実現するため、複数の数値モデルが提案されているが、非線形偏微分方程式として定式化されていることから、電子工学のみならず純粋数学や数値解析の分野でも関心を集めている。

本講演では、半導体の物性と半導体デバイスの仕組みについて簡単に述べた上で、デバイス・シミュレーションに用いられる数値モデルについて紹介する。近年、半導体デバイスの極微細化や、マルチ・ゲート MOSFET や FinFET など新しい構造のデバイスが開発されるのに伴い、デバイスの動作特性に対する量子効果の影響が無視できなくなっている。このような極微なデバイスの解析を行うための数値モデルとして、量子移流拡散モデル [1] が知られている。量子移流拡散モデルは古典的な移流拡散方程式に量子補正項を加えた形をしているため、従来の半導体の数値解析で用いられてきたアルゴリズムを応用することが可能であり、比較的少ない計算量により定常解を得ることができるといった長所がある。

量子移流拡散モデルの定常問題に対しては、すでに複数の数値解析スキームが提案されており、代表的なスキームとして Ancona[2], de Falco[3], Odanaka[4] により導出されたスキームが知られている。各々のスキームの主な相違点は、キャリア密度の正值性に対する数学的な保障の有無と、その具体的な手法にあると考えることができる。本講演では、以上の三つのスキームの特徴を示した上で、各々のスキームの収束性について数値実験による比較結果を紹介する。

2 半導体概論

半導体の特徴として、不純物を注入する（ドーピングとよぶ）ことによりキャリアの濃度を広い範囲で制御することができる性質があげられる。例えば、Si (シリコン) に P (リン) がドーピングされたとする。Si は第4族の原子であることから、価電子を4つ持っているのに対して、P は第5族の原子であることから価電子は5つある。そのため、1つのP原子のまわりに余分な電子が1つ生じることになる。余分な電子は自由電子としてSiの結晶内を運動することが可能であり、その一方でP原子は電子を1つ失うことから正のイオンとなる。このように半導体に不純物をドーピングした際に、自由電子をだす不純物をドナーと呼ぶ。またドナーをドーピングした半導体では、負 (negative) の電荷をもった電子がキャリアとして電気伝導を担うこと

から、このような半導体を N 型半導体と呼ぶ。

その一方で、Si に B (ホウ素) がドーピングされたときは、B は第 3 族の原子であり価電子を 3 つしか持たないことから、電子が 1 つ不足している状態になる。この電子の不足分は正孔とよばれ、あたかも正 (positive) の電荷をもったキャリアのような挙動を示す。B 原子のように正孔を供給するような不純物をアクセプタとよび、アクセプタがドーピングされた半導体を P 型半導体と呼ぶ。

電子工学の分野では、N 型半導体と P 型半導体を組み合わせることにより、様々な半導体デバイスが開発されている。ここでは代表例として図 1 に示す n チャネル MOS トランジスタを取り上げる。n チャネル MOS トランジスタでは P 型半導体の基盤に、N 型半導体の領域が 2 カ所設けられている。一方をソースとよび、他方をドレインとよぶ。中央をチャンネルとよび、電流を制御するためのゲートが設けられている。ゲートと P 型半導体との間には酸化膜が接合されている。ゲートに電圧がかかっていない状態では、ソース - チャンネル間・チャンネル - ドレイン間では pn 接合 (P 型半導体と N 型半導体が接合している状態) が形成されている。pn 接合には一方向しか電流が生じない整流効果があるため、ドレインに電圧をかけてもチャンネルに電流が生じない。その一方でゲートの電圧を高くすると、酸化膜と半導体との界面に電子が生じるため、チャンネルに電流が生じる。以上の仕組みにより、集積回路を構成するデバイスのスイッチ作用が実現されている。

以上で述べたような半導体デバイスを設計する際に、実験の前処理として数値シミュレーションが用いられている。次節では、シミュレーションで用いられているモデル方程式について紹介する。

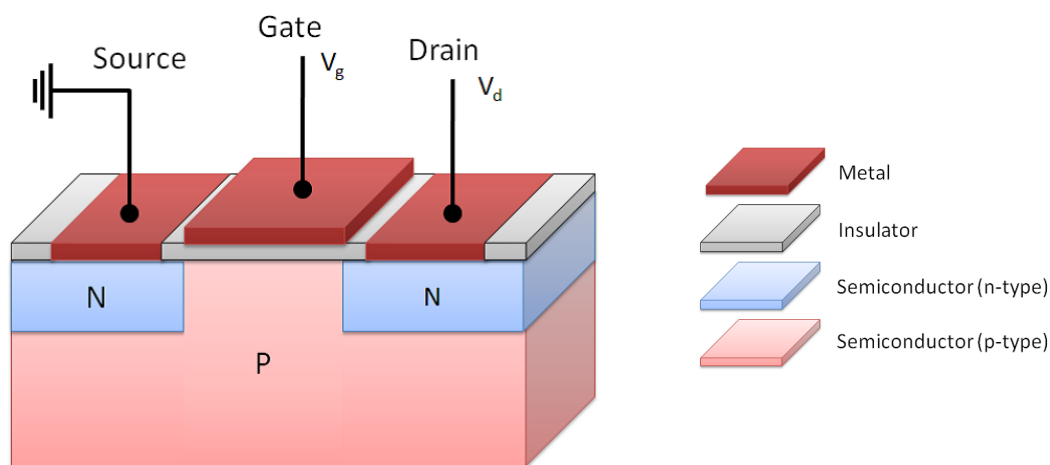


Figure1 n チャネル MOS トランジスタ

3 量子移流拡散モデル

従来のデバイス・シミュレータでは、移流拡散方程式によりキャリアの輸送過程をモデリングした Drift Diffusion モデルが数理モデルとして用いられていた。近年電子デバイスの極微細化により、量子効果を考慮したシミュレーションが必要と考えられ、Drift Diffusion モデルを拡張した量子移流拡散モデルが導出され

た．無次元化された量子移流拡散モデルの定常問題は，以下の方程式系により記述される．

$$\nabla \cdot (\lambda^2 \nabla \phi) = n - p - D, \quad (1a)$$

$$\nabla \cdot (\mu_n n \nabla (\phi - \log n + \gamma_n)) = 0, \quad (1b)$$

$$-\nabla \cdot (\mu_p p \nabla (\phi + \log p - \gamma_p)) = 0, \quad (1c)$$

$$\gamma_n := 2b_n \frac{\nabla^2 \sqrt{n}}{\sqrt{n}}, \quad (1d)$$

$$\gamma_p := 2b_p \frac{\nabla^2 \sqrt{p}}{\sqrt{p}}. \quad (1e)$$

ここで ϕ, n, p は未知関数でそれぞれ電位，電子密度，正孔密度を表している． D はドーピングプロファイルと呼ばれ，半導体中の不純物の分布を表わす関数であり，空間変数にのみ依存する． λ はデバイ長を表わし， μ_n, μ_p はそれぞれ電子と正孔の移動度を表わす． b_n, b_p はそれぞれ電子と正孔の有効質量と，プランク定数により決定される定数である．

(1a) が静電場を記述する Poisson 方程式であり，(1b)，(1c) がそれぞれ電子と正孔に関する連続の方程式である．連続の方程式のうち γ_n, γ_p が量子補正項であり，(1d)，(1e) により定義される． γ_n, γ_p をともにゼロとおくと，従来の半導体の数値解析で用いられてきた Drift Diffusion モデルとなる．次節では，量子移流拡散モデルの定常解を求めるための反復法について紹介する．

4 反復法

4.1 Ancona のスキーム

以下では簡単のため，キャリアとして電子のみを考慮するモノポーラ・モデルについて議論する．量子移流拡散モデルは四階の偏微分方程式であるが，変数変換を導入することにより二つの二階の偏微分方程式に分離できることが知られている．Ancona[2] に従い変数変換を行うと以下の方程式系が得られる．

$$\nabla \cdot (\lambda^2 \nabla \phi) = e^{\phi - \phi_n + \gamma_n} - D, \quad (2a)$$

$$\nabla \cdot (\mu_n n \nabla \phi_n) = 0, \quad (2b)$$

$$-b_n \nabla^2 S_n + \frac{S_n}{2} (2 \log S_n - \phi + \phi_n) = 0, \quad (2c)$$

ここで $\phi_n = \phi - \log n + \gamma_n, S_n = \sqrt{n}$ であり，未知関数 (ϕ, ϕ_n, S_n) について解くことを考える．

Ancona は (2a) に対しては中心差分法により，(2b) と (2c) に対しては指数法 [7] により離散化を行い差分スキームを構成した．Anocna のスキームに対してはいくつかの欠点が指摘されている．例えば差分方程式の解を得るためには，代数方程式を Newton 法により線形化を行うことが考えられるが，線形化方程式を解くために必要な計算機の記憶容量や計算量が大きくなる恐れがある．さらに Newton 法による反復の過程でキャリア密度の正値性が保障されないことが指摘される．

4.2 de Falco のスキーム

以上の点を改善するために de Falco[3] は，古典的なデバイス・シミュレータで用いられていた Gummel 法 [6] を量子移流拡散モデルに適用できるように拡張することで，反復法を構成した．Gummel 法は，連立方程式を分離して，単独の偏微分方程式を繰り返し解くことにより，定常解を探索する手法である．なお，未知関数は Ancona のスキームと同一とする．

ただし (2a), (2c) は単独の偏微分方程式としても非線形であることから, 各々に対して Newton 法を用いて線形化する必要がある. 特に (2c) に対しては, キャリア密度の正值性を保障するために以下の modified Newton 法を用いる.

$$-b_n \nabla^2 S_n^{k+1} + \frac{S_n^{k+1}}{2} (2 \log S_n^k - \phi + \phi_n) + \frac{S_n^{k+1}}{t_k} = \frac{S_n^k}{t_k}, \quad (3)$$

ここで t_k はダンピング・パラメータで, 以下の条件を満たす,

$$t_k < \frac{2}{|\inf(2 \log S_n^k - \phi + \phi_n)|}. \quad (4)$$

各ステップ k に対して, S_n^{k+1} を未知関数として (3) を解く. 正值性の条件 (4) より, 量子ポテンシャル ($\gamma_n = 2 \log S_n - \phi + \phi_n$) の絶対値が十分大きいとき $t_k < 1$ になることから, modified Newton 法は通常の Newton 法 ($t_k = 1$) よりも変動を緩和した反復法になる. 実際この条件は必要で, 通常の Newton 法を用いると計算が発散することが, 数値実験により確認できている.

de Falco のスキームの長所は, Gummel 法を用いていることから反復計算に必要な計算資源が比較的少なく済むことと, 正值性が保障されることが挙げられる.

4.3 Odanaka のスキーム

以上の二つのスキームでは, 未知関数を (ϕ, ϕ_n, S_n) としていたが, Odanaka[4] は新たな変数 $u_n = \frac{1}{2} \log n$ を導入することで以下の方程式系を得た.

$$\nabla \cdot (\lambda^2 \nabla \phi) = e^{\phi - \phi_n + \gamma_n} - D, \quad (5a)$$

$$\nabla \cdot (\mu_n n \nabla \phi_n) = 0, \quad (5b)$$

$$-b_n \nabla \cdot (S_n \nabla u_n) + S_n u_n = S_n (\phi - \phi_n) / 2, \quad (5c)$$

未知関数を (ϕ, ϕ_n, u_n) とし, (5a)-(5c) に対して Gummel 法を適用することで, 新たな反復法が得られる.

Odanaka のスキームの長所は, 量子ポテンシャルの方程式 (5c) は u_n について線形であるため, de Falco のスキームのように modified Newton 法などの反復法を必要としないことと, キャリア密度の正值性が $n = \exp(2u_n)$ より, 自動的に保障されることが挙げられる.

5 数値実験

解析例として, 空間二次元上のダブルゲート MOSFET の計算結果を示す. チャネル長を 20 nm とし, チャネルの厚みを 8 nm とする. 酸化膜の厚みを 2 nm とする. p 領域のアクセプタの密度を $1.0 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ とし, n 領域のドナーの密度を $1.0 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ とする. 図 1, 図 2 はそれぞれ量子移流拡散モデルと Drift Diffusion モデルの定常解析により得られた電子密度の分布である. ゲート電圧とドレイン電圧を共に 1.0V としている. 二つのモデルの計算結果を比較すると, 量子移流拡散モデルによる計算結果では, 酸化膜に接する界面に境界層が形成されているが, Drift Diffusion モデルによる計算結果では確認できない. この違いは, 量子移流拡散モデルには量子補正項を含むことから, 絶縁体と半導体の間で生じるトンネル効果が考慮されているためである. 実際の半導体デバイスでも, そのスケールが数 nm のオーダーまで極小化すると, トンネル効果によりリーク電流が生じることが知られている. そのため, 極微なデバイスの動作特性をコンピュータで評価するには, 量子効果を考慮したモデル方程式を用いる必要があると考えられている.

図3, 図4に定常解を求めるのに必要なマトリックスソルバーの反復回数を示す. 図3は Id-V_d 特性を求める際に必要な反復回数を示している. ゲート電圧を 1.0[V] に固定し, ドレイン電圧を昇圧させる. なお, 反復の初期値は熱平衡状態の分布を用いている. ドレイン電圧が大きくなるにつれ, 両スキームの差は次第に顕著になり, やや Odanaka のスキームの方が速く収束する. 図4は Id-V_g 特性を求める際に必要な反復回数を示している. ドレイン電圧を 0.05[V] に固定し, ゲート電圧を昇圧させる. 低いゲート電圧では, de Falco のスキームの方が収束が速いが, 昇圧させるのに応じて両スキームの差異は次第に小さくなる.

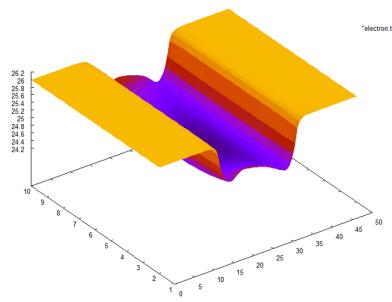
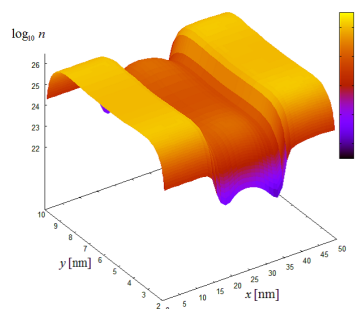


Figure2 量子移流拡散モデル

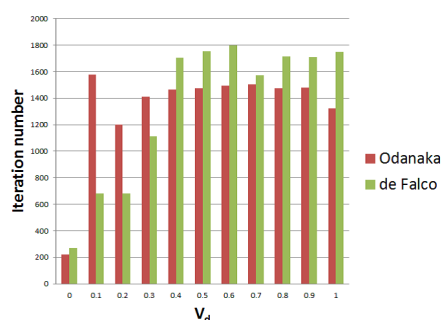


Figure4 $V_g = 1.0$ [V], $V_d = 0 \rightarrow 1.0$ [V]

Figure3 Drift Diffusion モデル

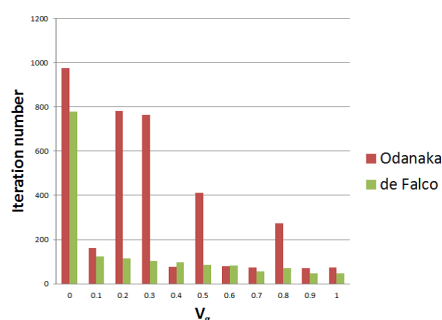


Figure5 $V_d = 0.05$ [V], $V_g = 0 \rightarrow 1.0$ [V]

References

- [1] M. G. Ancona, H. F. Tiersten, "Macroscopic physics of the silicon inversion layer", Phys. Rev. B, vol. 35, no. 15, pp. 7959-7965, 1987.
- [2] M. G. Ancona, "Finite-difference schemes for the density gradient equations", J. Comput. Electron. 1, 435-443, 2002.
- [3] C. de Falco, E. Gatti, A. L. Lacaita, R. Sacco, "Quantum-corrected drift-diffusion models for transport in semiconductor devices", J. Comp. Phys. 204, pp. 533-561, 2005.
- [4] S. Odanaka, "Multidimensional discretization of the stationary quantum drift-diffusion model for ultrasmall MOSFET structures", IEEE Trans. Comput. Aided Des. Integr. Circuits Syst., vol. 23, no. 6, pp. 837-842, 2004.

- [5] T. Shimada, S. Odanaka, “A numerical method for a transient quantum drift-diffusion model arising in semiconductor devices”, *J. Comput. Electron*, no. 4, pp.485-493, 2008.
- [6] H. K. Gummel, “A self-consistent iterative scheme for one-dimensional steady state transistor calculations”, *IEEE Trans. Elec. Dev*, vol. pp. 455-465, 1964.
- [7] D. L. Scharfetter, H. K. Gummel, “Large-signal analysis of a silicon read diode oscillator”, *IEEE Trans. Elec. Dev*, vol. ED-16, no. 1, pp. 64-77, 1969. S. Selberherr, *Analysis and Simulation of Semiconductor Devices*, Springer-Verlag, Wien, 1984.