

● ナノスケールデバイスの量子輸送シミュレーション

極限まで素子の微細化が追求され、シリコンMOS型トランジスタのチャンネル長は既に50nmを切り、研究レベルでは10nm以下の素子動作も報告されている。この長さは、室温におけるフォノン散乱の平均自由行程と同程度かそれ以下である。このような微細素子の動作理解やモデル化では、従来我々が使い慣れてきた体系の修正ではなく、大胆な転換が必要となる。一方、素子が極度に微細化された結果、近年、単純な比例縮小則のみによる性能向上の限界も顕在化しつつある。現在、この状況の打破を目指して様々な素子構造・材料が提案され、試作されている。

このような背景のなか、シミュレーションによって優れた素子構造・材料の探索や集積システム的设计を支援すると同時に、MOS型素子の究極の限界がどこにあるかを明らかにすることがデバイスモデリングに強く求められている。我々は、原子論からの統合シミュレーション環境の実現を目指し、非平衡グリーン関数法に基づくデバイスシミュレータの開発を行っている。

1. 立体構造 MOS 型素子におけるしきい値ばらつきの量子輸送シミュレーション

ダブルゲート(DG)型やゲートオールアラウンド(GAA)型などの立体構造素子は、極めて短いゲート長においても良好なゲート制御性を有することから、次世代の素子構造として期待されている。しかし、ナノスケール立体構造素子では、量子力学的な閉じ込めが強いため、界面ラフネスの影響をより強く受けることが懸念される。本年度、DG MOS-FET、GAA MOSFETにおいて、界面ラフネスがしきい値ばらつきに与える影響について調べた。その結果、実効的なゲート幅が等しい場合、DG型素子は、GAA型素子と比べて、しきい値ばらつきが半分程度に収まることを見出し、しきい値シフトに対する簡易モデルを構築した^[1]。

2. 原子論に基づくナノワイヤトランジスタの量子輸送シミュレーション

有望なトランジスタ材料(原子、結晶方位、ひずみ制御を含む)を膨大な選択肢の中から探索する際に、ユーザが材料毎にパラメータを与える必要のある有効質量近似では対応が困難であり、第一原理的アプローチが必須である。一方で、実用的に有用な解析を行うためには計算速度も重要なファクタである。そこで、我々は、新しい計算アルゴリズムの導入により短時間処理を可能とした原子論に基づく量子輸送シミュレータの開発を行っている。本年度、R

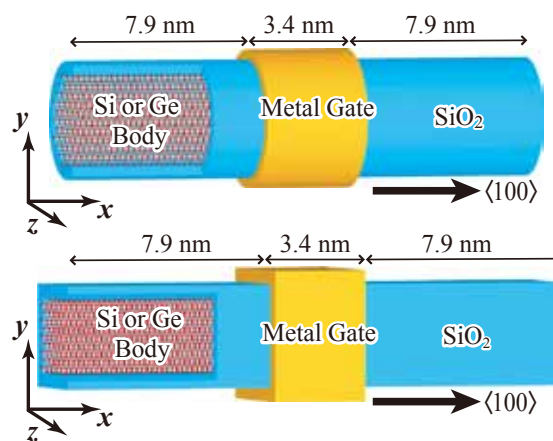


図1 ナノワイヤ(NW)トランジスタ

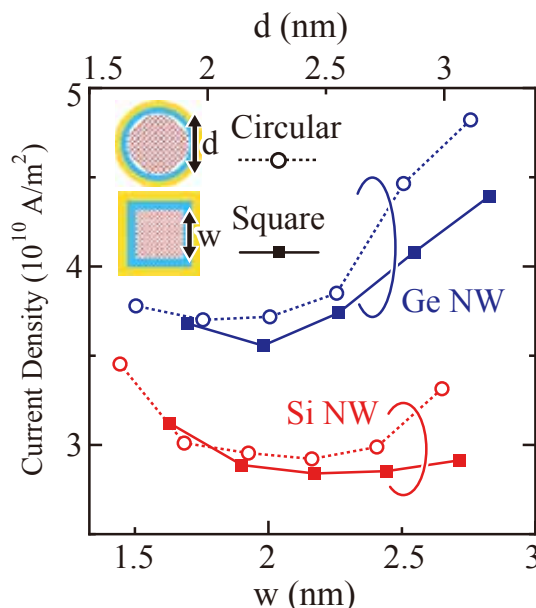


図2 NWトランジスタの電流密度のサイズ依存性

行列理論に基づく原子論的計算手法を新たに開発した^[2]。また、ナノワイヤトランジスタの原子論的シミュレーションから、ホール輸送において、オフバレーが重要な役割を演じることを見出した(図2、3)^[3]。

3. ナノシリコン列における電子輸送のモンテカルロシミュレーション

ナノシリコン列準弾道電子放出源がディスプレイや電子ビーム露光装置などに应用されている。準弾道電子放出の物理的メカニズムを明らかにし、デバイス構造の最適化を行うため、ナノシリコン列における準弾道電子放出のモデル化を行なった(図3)。その結果、初期加速領域が存在し、そこを抜け出ると、短いトンネル時間・準連続状態となるため、隣り合うナノシリコン間を弾道的に飛び移ることが可能となり、最終的に準弾道的な電子放出となることが分かった^[4]。

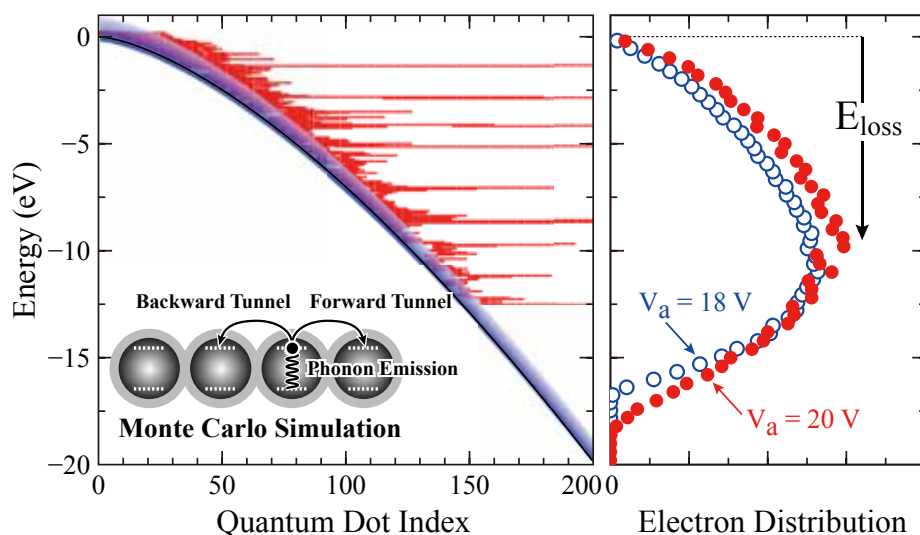


図3 ナノシリコン列からの準弾道電子放出

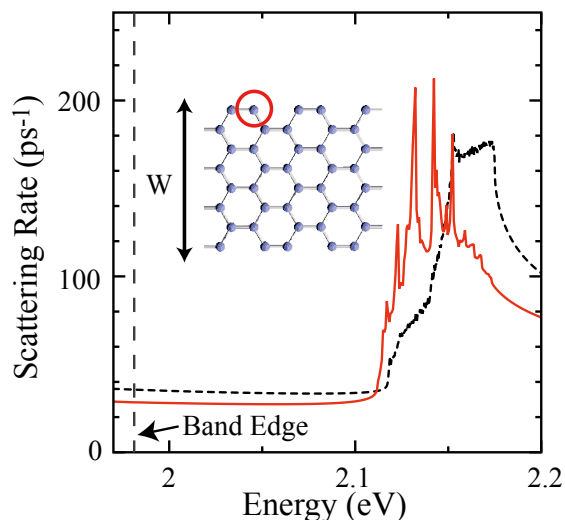


図4 GNRの光学フォノン放出確率

4. シリコンナノ構造における電子-フォノン相互作用

ナノデバイスにおけるフォノン輸送と電子輸送をつなぐ電子フォノン相互作用の普遍的理解を得るため、ナノワイヤ構造での電子・音響フォノン相互作用の強度指標となる形状因子の詳細な計算を行った^[5]。電子波動関数にゲート電圧印加による変調の効果を取り込み、音響フォノンとしてシリコン/SiO₂酸化膜構造での変調音響フォノンを用いた。変調音響フォノンを用いる事で形状因子が増加し、増加率は、ゲート電圧印加による電子波動関数の変調効果を取り込むことでさらに増加することが明らかになった。

5. グラフェンナノリボンにおける電子-フォノン相互作用の原子論的モデリング

グラフェンナノリボン(GNR)において、変調光学フォノンによる電子の散乱確率を計算し、バルク

フォノンモデルの結果と比較した。その結果、もっとも端に存在する原子において、両者に顕著な違いを見出した(図4)。

参考文献

- [1] N. Mori and H. Minari, Japanese Journal of Applied Physics, 49, 04DC05 (2010).
- [2] G. Mil'nikov, N. Mori, and Y. Kamakura, Physical Review B, 79, 235337 (2009).
- [3] H. Minari and N. Mori, Japanese Journal of Applied Physics, 49, 04DN04 (2010).
- [4] N. Mori, H. Minari, S. Uno, H. Mizuta, and N. Koshida, International Symposium on Atom-scale Silicon Hybrid Nanotechnologies for 'More-than-Moore' and 'Beyond-CMOS' Era, Southampton, UK, March 1-2, 2010 (invited).
- [5] S. Uno, D. Yong, and N. Mori, Physical Review B, 79, 235328 (2009).