

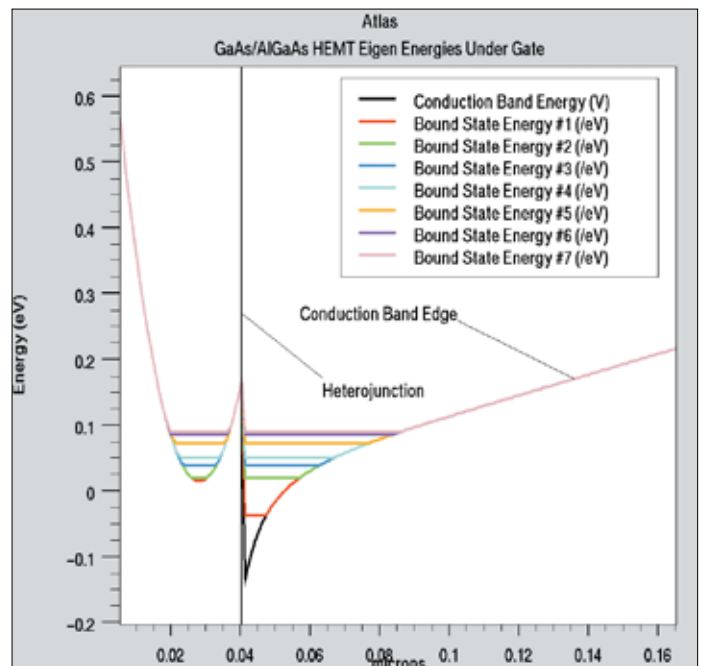
Quantum

量子力学2次元効果シミュレーション・モジュール

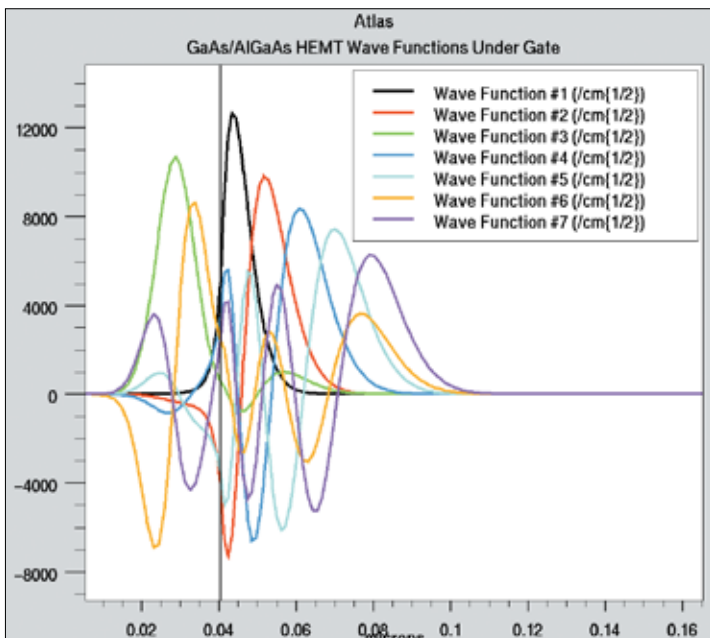
Quantum は、半導体デバイスにおけるキャリアの量子閉じ込めおよび量子輸送など、さまざまな効果をシミュレートするモデルを提供します。セルフコンシステントなシュレディンガー-ポアソン方程式のソルバにより、静電ポテンシャルとセルフコンシステントに基底状態エネルギーのキャリアの波動関数が計算できます。シュレディンガー方程式によるソルバは、非平衡グリーン関数法 (Non-equilibrium Green's Function: NEGF) アプローチと連立させることができるため、強い横の閉じ込め状態にある 2 次元デバイスまたは円柱形デバイスのバリスティック量子輸送のモデリングが可能です。ナノスケール・デバイスのサブバンド輸送をモデリングするための別のアプローチとして、横方向のシュレディンガー方程式と 1 次元ドリフト拡散方程式を連立させたドリフト拡散モード・スペース・モデルがあります。量子モーメント輸送モデルにより、キャリア輸送における閉じ込め効果をシミュレートできます。そして、この方法は従来のドリフト拡散アプローチと同様に、容易に実行可能です。この量子閉じ込め効果は、エネルギー・バランス / 流体輸送モデルにも含まれています。量子井戸モデルは発光デバイスにおける利得および自然再結合を計算する場合に閉じ込め効果を考慮します。Quantum は、シュレディンガー方程式を解くことによりトンネル電流を計算する非局所トンネル・モデルを備えています。このモデルは、トンネル電流における量子閉じ込め効果をオプションとして含み、バンド間トンネル・モデルおよび酸化膜トンネル・モデルに使用することが可能です。

シュレディンガー-ポアソン方程式

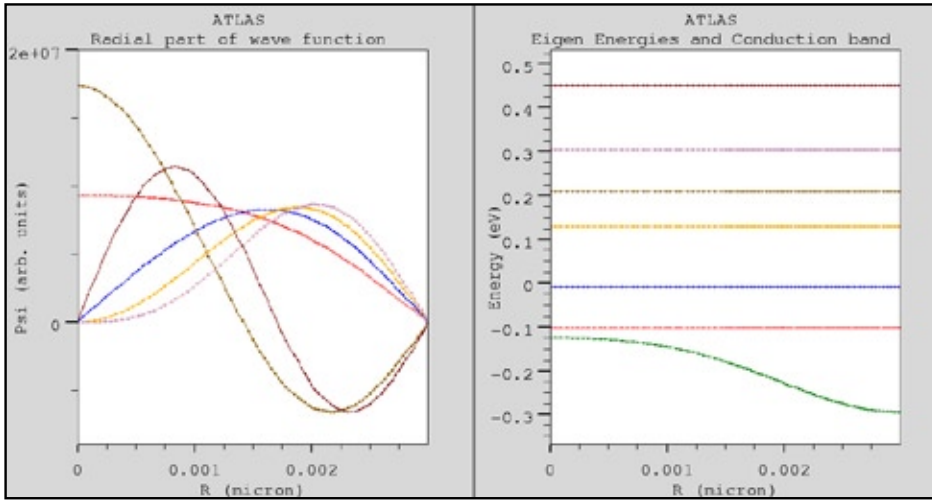
量子閉じ込め効果をモデリングするために、Quantum では、シュレディンガー-ポアソン方程式を使用したセルフコンシステントなソリューションを提供します。1 次元、2 次元または円柱形状でシュレディンガー方程式を解き、固有エネルギーおよび波動関数を求めることができます。シュレディンガー方程式で得られた固有エネルギーおよび波動関数は、量子化された電子密度を求める際に使用され、次に 2 次元ポアソン方程式に引き継がれます。Quantum は、同じ矩形メッシュまたは三角形メッシュに対してシュレディンガー方程式とポアソン方程式を解くことが可能です。また、独自のシュレディンガー方程式の矩形メッシュを作成し、量子化をポアソン方程式のメッシュに補間することができます。予測・修正法を使用することで、高速な収束が実現します。リアル・スペースの 2 次元シュレディンガー・ソルバに加えて、高速プロダクト・スペース・ソルバが利用可能です。これにより、2 方向における 1 次元ソリューションで得たプロダクトの線形組み合わせとして 2 次元波動関数を求めます。この方法による計算時間は 1 方向におけるノード数に比例します。これにより、矩形に近い形状を持つかなり規模の大きいデバイス構造をシミュレートすることが可能です。



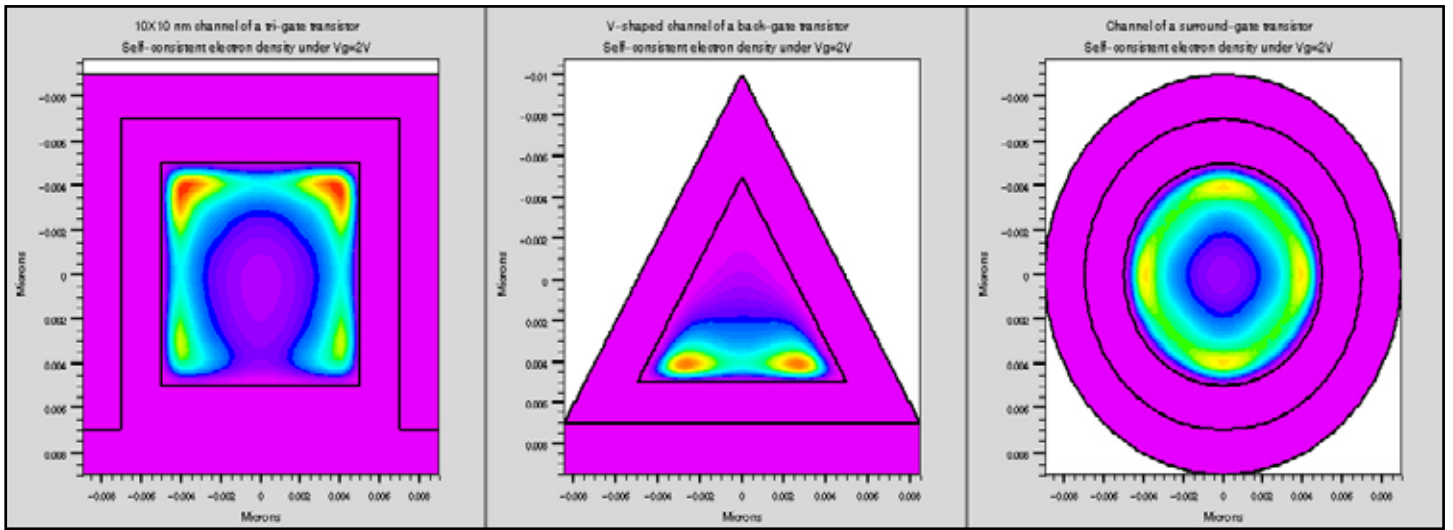
上図は、GaAs/ AlGaAs HEMT デバイス構造のゲート下の伝導帯のポテンシャル変動ならびに最初の 7 つのエネルギー準位を示しています。ヘトリ口接合による閉じ込めおよび AlGaAs 上層の空乏によるポテンシャル井戸が存在することがわかります。



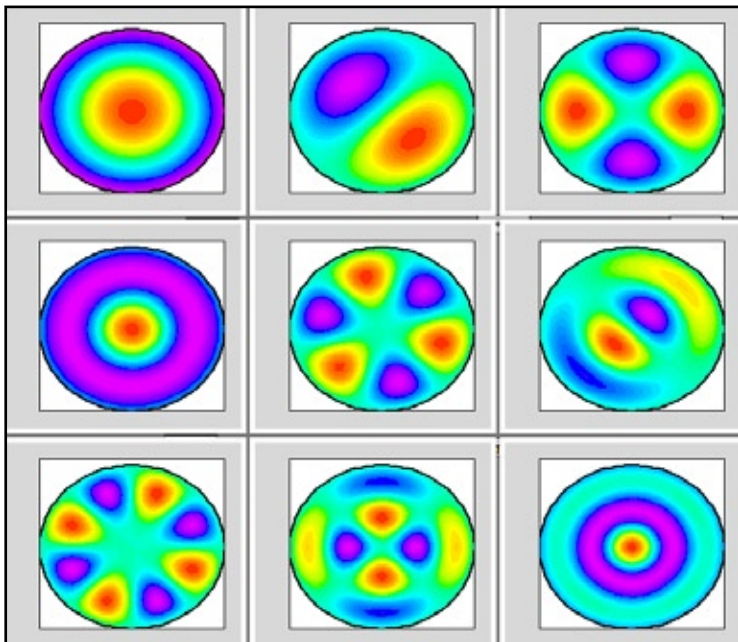
左図は、最初の 7 つの電子波動関数を示しています。これらの波動関数は最下位から 7 つのエネルギー準位に対応しています。波動関数は、AlGaAs 層のゲート直下の空乏により形成されたポテンシャル井戸のためヘトリ口接合の両側でピークが存在します。



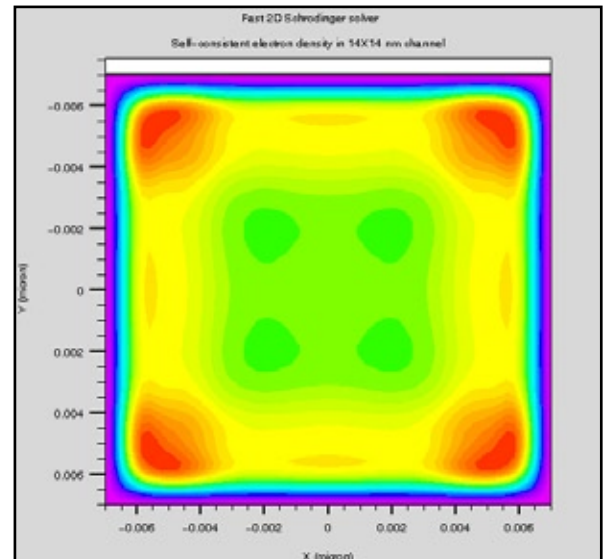
円筒座標系のシュレディンガー・ソルバによって求められた半径における電子の波動関数（左図）と固有エネルギー（右図）です。異なる半径 / 軌道量子数の固有状態が合計固有エネルギーに対してソートされています。



上図は、2Vのゲート・バイアスにおける矩形、三角形、円形のチャンネルのセルフコンシステントな量子化された電子密度を示しています。これらの例では、異方性有効質量を持つシリコン・チャンネル、アルミニウム・ゲート、1nmの酸化膜の構造を推定しています。また、三角形メッシュ、2次元リアル・スペース・シュレディンガー・ソルバが使用されました。



イン・プレーン有効質量 $m_x=m_y=m_t=0.19m_0$ およびアウト・プレーン質量 $m_z=m_e=0.91m_0$ の谷を持つサラウンド・ゲート型トランジスタの直径10nmのチャンネルにおける波動関数を示しています。

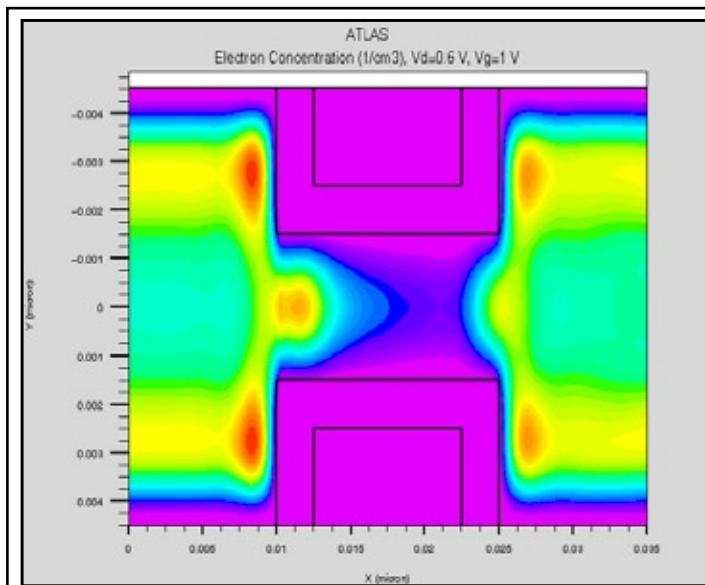


グリッド・ポイント数5041のメッシュ上の高速なプロダクト・スペース2次元シュレディンガー・ソルバにより求められた、 10^{20} cm^{-3} にドーピングされた14x14 nm矩形構造のセルフコンシステントな量子化された電子密度を示しています。

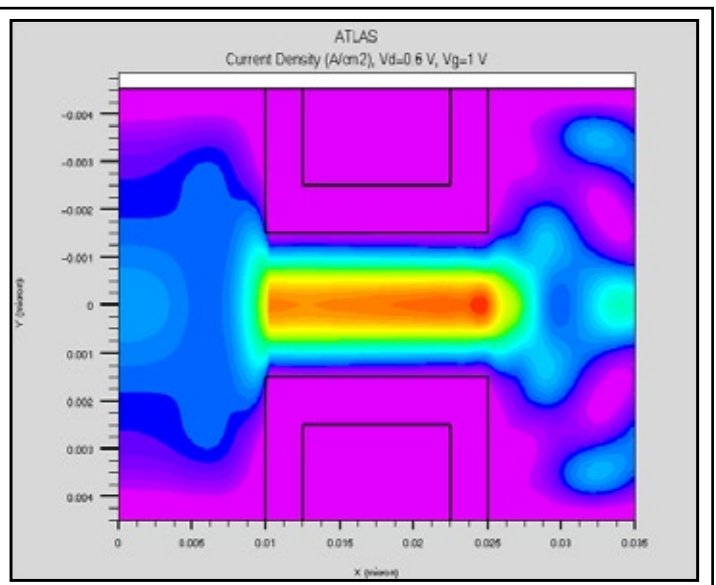
非平衡グリーン関数法によるバリスティック量子輸送

MOS 電界効果トランジスタがナノメータ構造体に微細化されるにつれ、横方向と輸送方向の両方向における量子効果はデバイスの特性を決定するために主要な役割を果たすようになりました。この新しい挑戦に取り組むために、シルバコは非平衡グリーン関数法 (NEGF) をベースにした新しい量子力学モデルを展開しました。このモデルは完全な量子力学アプローチで、ソースドレイン・トンネル効果、バリスティック輸送効果、量子閉じ込め効果のような効果を同時に扱います。この新しい NEGF ソルバによって、矩形または円柱形状を使用した、ダブル・ゲート型またはサラウンド・ゲート型 MOSFET などのデバイスのバリスティック量子輸送がモデリングできます。モデリングは、まず最初に、デバイスの横断片に対して 1 次元シュレディンガー方程式のソリューションを実行し、固有関数と固有エネルギーを求めます。

次に、ソース領域からドレイン領域へ伝播していく、さまざまなサブバンド (モード) における電子密度および電流を、NEGF 量子輸送方程式で計算します。一般的に、電子モードの結合の分析には、結合モード・スペース (Coupled Mode Space : CMS) 方式が使用されます。均一の断面のようなよりシンプルな場合は、分離モード・スペース (Uncoupled Mode Space : UMS) 方式を使用することも可能です。NEGF シミュレーションを用いて一般的な電流-電圧特性、セルフコンシステントな量子化された電子 / 電流密度を求めます。また、透過係数、局所状態密度、単位エネルギーごとの電子 / 電流密度などエネルギー依存量を保存することでデバイスの物理を明確にします。

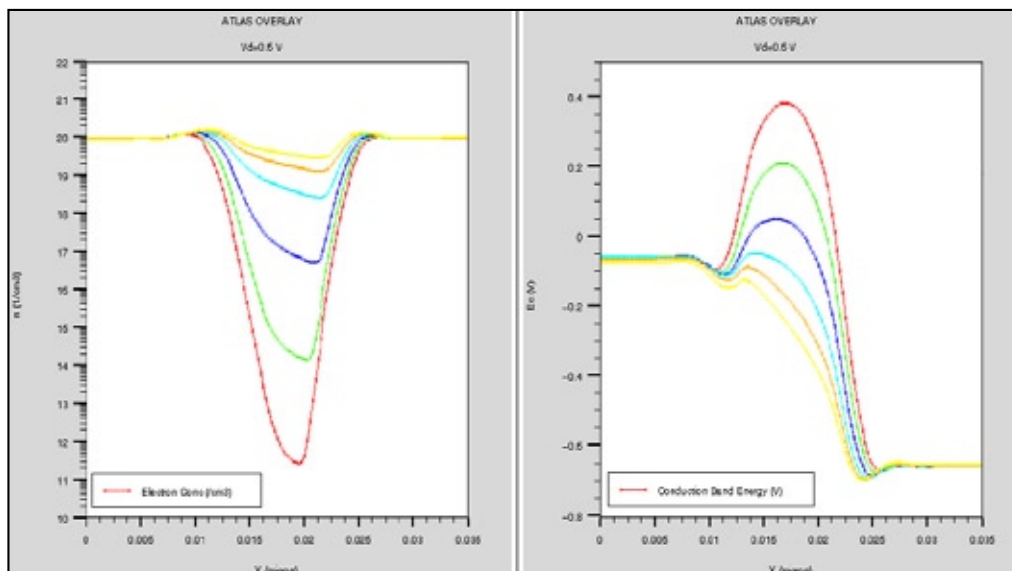


横方向および輸送方向における量子化された電子密度分布を考慮しています。



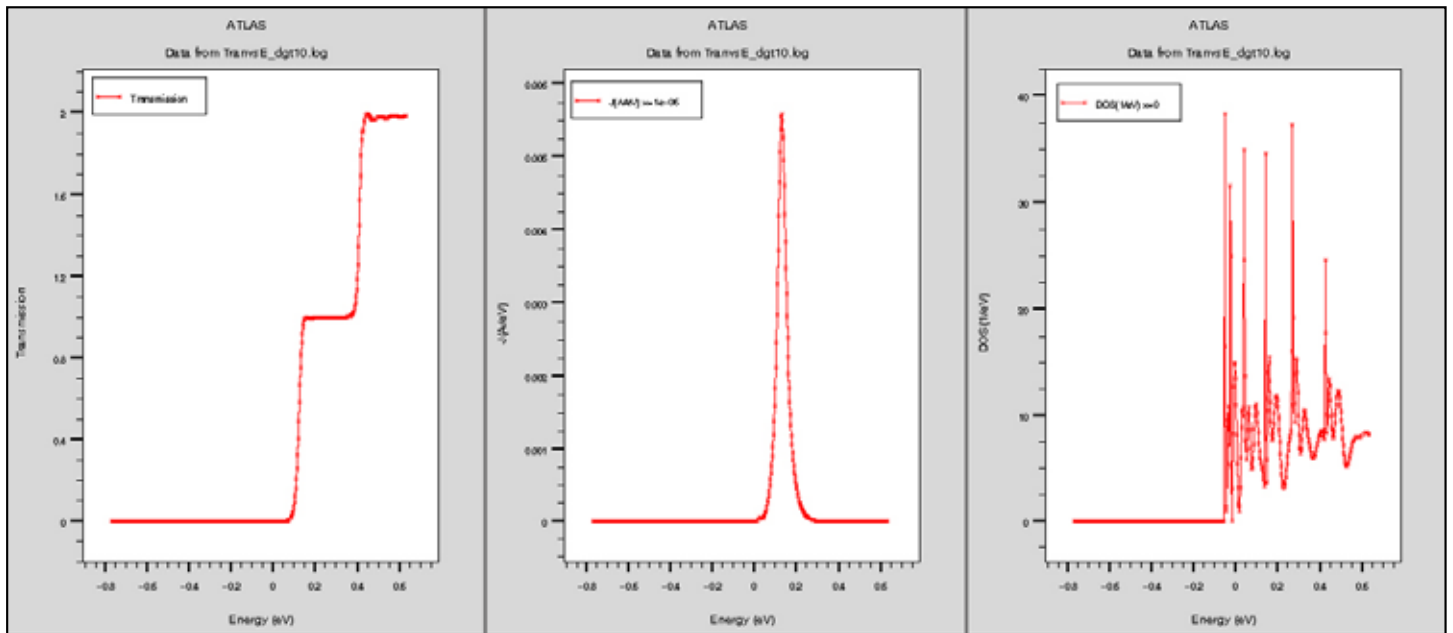
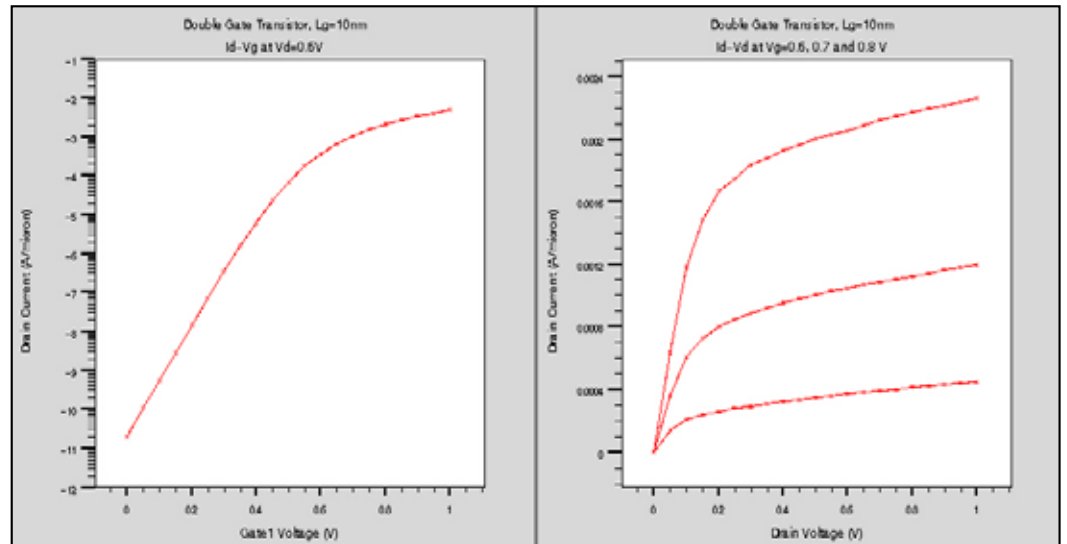
チャンネルのアクセス部分が張り出した形状により、ソースとドレインの拡張領域に電流が広がります。

$V_g = 1V$ 時のダブル・ゲート型トランジスタにおけるセルフコンシステントに得られた電子密度の 2 次元等高分布 (左図) および電流フロー (右図)



さまざまなゲート・バイアスに対してダブル・ゲート型トランジスタの輸送方向に沿った座標に対する電子密度 (左図) および伝導帯エネルギー (右図) です。

NEGF アプローチで計算した、バリスティック・ダブル・ゲート型トランジスタ (DGT) の I_d - V_g 特性 (左図) および I_d - V_d 特性 (右図) です。バリスティック輸送の条件により、計算された電流はデバイス構造に対して飽和します。

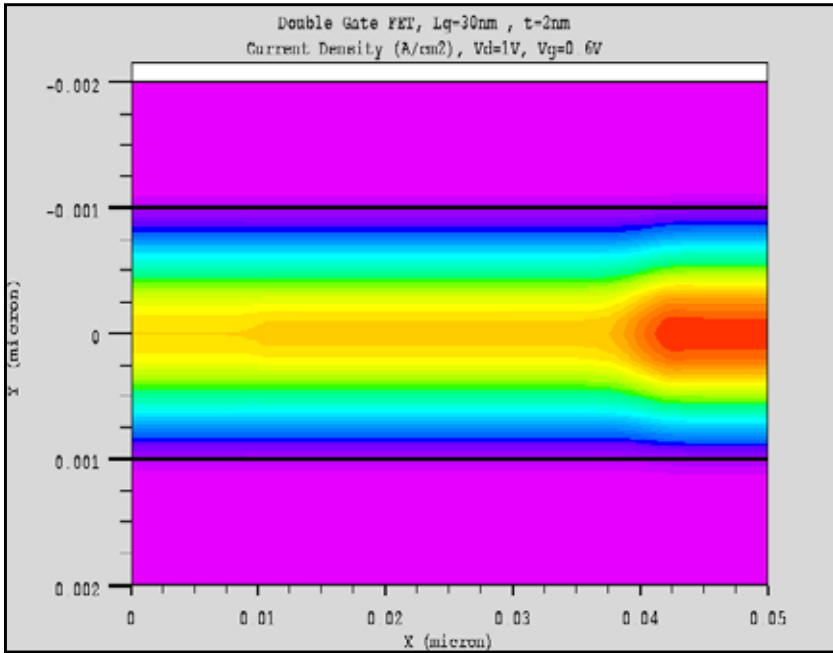


バリスティック・ダブル・ゲート型トランジスタにおける透過係数 (左図)、電流スペクトル (中央図)、状態密度 (右図) を示しています。(a) 透過係数の各段階は輸送に有効になる余剰な電子のサブバンドに対応します。(b) 最初のサブバンドは電流値に大きく寄与します。(c) ソース拡張領域における状態密度の振動は注入障壁での電子反射によるものです。

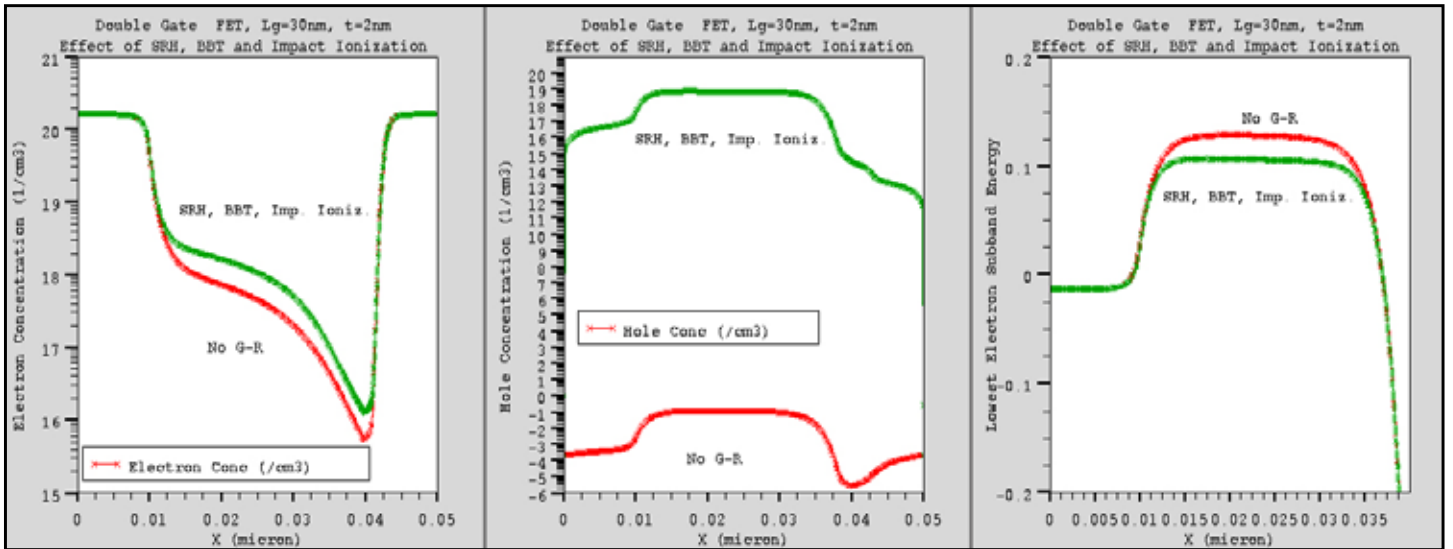
ドリフト拡散モード・スペース・モデル

ドリフト拡散モード・スペース (Drift Diffusion Mode-Space: DDMS) モデルは、強い横の閉じ込め状態にあるデバイスにおけるキャリア輸送の準古典的なアプローチです。このモデルは、NEGF モード・スペースよりもシンプルなアプローチです。NEGF モード・スペース・アプローチ同様に、横方向の 1 次元 / 円柱形シュレディンガー方程式と各サブバンドの 1 次元輸送方程式に分離されます。ただし、このモデルでは、量子輸送方程式の代わりに、古典ドリフト拡散方程式を解きます。

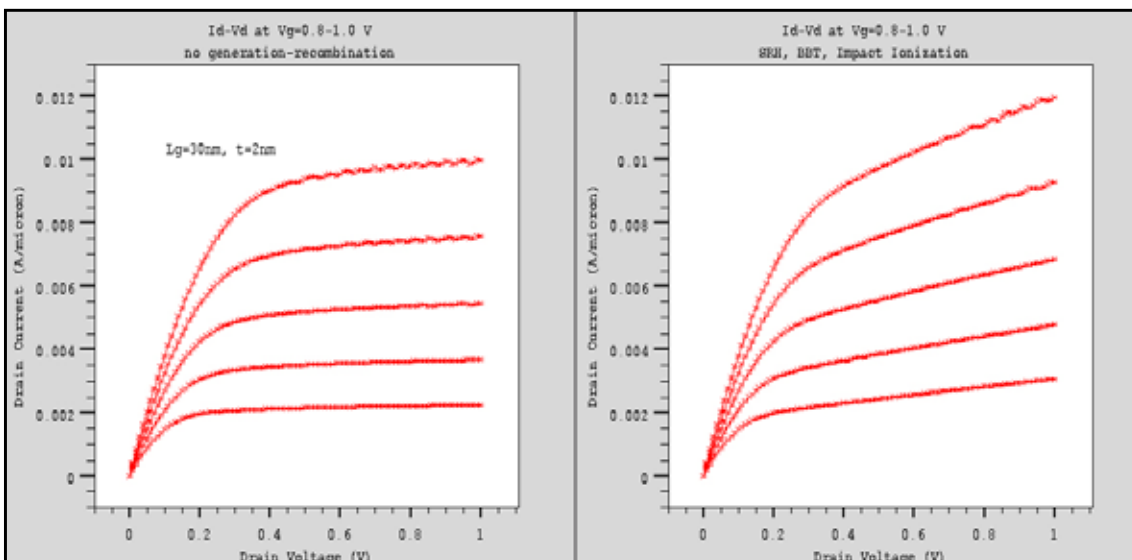
したがって、このモデルは、横方向における量子効果を得ることができませんが、移動度、再結合、インパクト・イオン化、バンド間トンネル効果の ATLAS モデルをすべて継承しています。



左図は、DDMSにより計算された、ダブル・ゲート型FET (Lg=30nm、ボディ厚 t=2nm) における電流フローを示しています。トラップ再結合 (SRH)、バンド間トンネル効果 (BBT)、インパクト・イオン化が存在する各サブバンドで1次元のドリフト拡散方程式を解きました。電流密度は、電子・ホール・ペアの生成のため、チャンネルの端で増大しています。



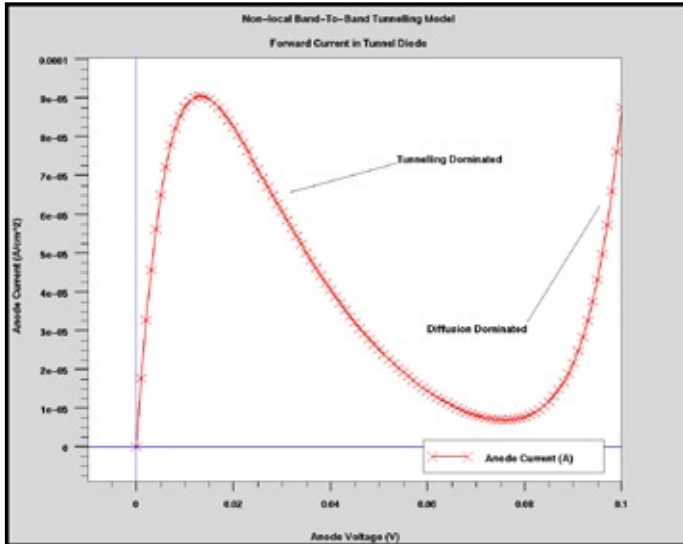
電子のキャリア密度 (左図)、ホールのキャリア密度 (中央図)、電子サブバンド最低エネルギー (右図) です。緑線は生成再結合を考慮した場合を示し、赤線は生成再結合を考慮しなかった場合を示しています。電子・ホール・ペアの生成は、チャンネルに蓄積されることにより、電子密度はわずかに増大 (左図) し、ホール密度はかなり増大 (中央図) していることがわかります。電荷蓄積により、しきい値電圧はリセットされ、電子に対するソース接合障壁が低下することがわかります (右図)。



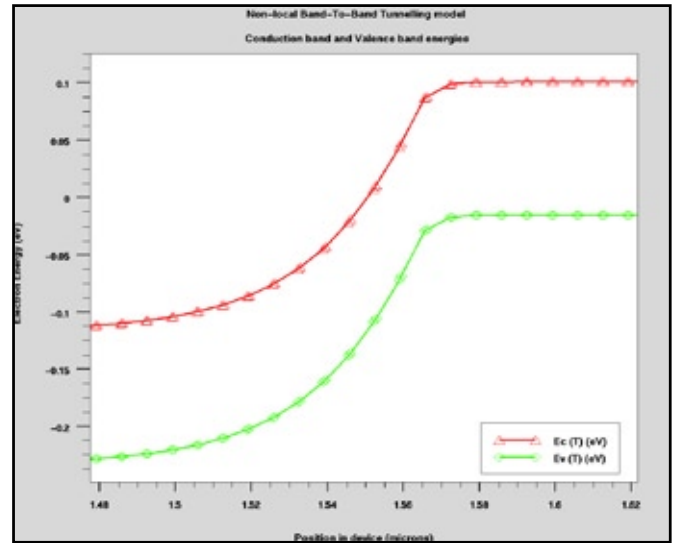
DDMSで計算されたドレイン電流 - 電圧の特性による大きなフローティング・ボディ効果とわずかな飽和を示しています。左図は生成再結合を考慮していない場合の電流 - 電圧特性を示し、右図はBBTとインパクト・イオン化を考慮した場合の電流 - 電圧特性を示しています。

バンド間量子トンネル・モデル

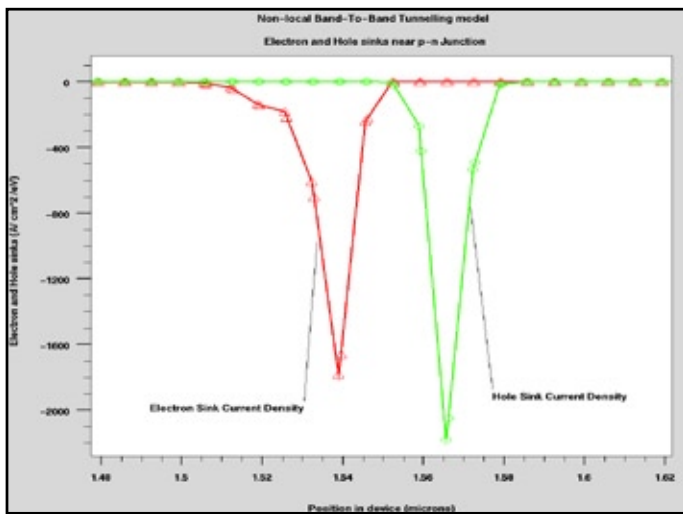
Quantum は、半導体におけるバンド間トンネル電流を計算する機能を備えています。トラップがアシストする成分とダイレクト成分の両方を計算することが可能です。ダイレクト成分は局所モデルまたは非局所モデルを用いて計算します。局所モデルでは、各ポイントにおける電子・ホール・ペアの生成率を求めるためにそのポイントの電界を使用しています。非局所モデルでは、トンネリングが可能な各エネルギーに対するトンネル電流をより高度に計算します。さらに、キャリアのソース（逆バイアス）とシンク（順バイアス）がデバイスの中で正確に空間的に分離された位置で発生します。非局所モデルを用いて計算されたトンネル・ダイオードの順電流の例を次の図に示します。



Hg_{0.78} Cd_{0.22} Te を縮退的にドーピングした p-n 型構造で構成されたトンネル・ダイオードに対する電流 / 電圧曲線です。材料のバンドギャップは 116 meV、デバイス温度は 80 K です。



トンネル・ダイオードの位置に対する伝導帯 (Ec) エネルギー・プロファイルと価電子帯 (Ev) エネルギー・プロファイルを示しています。アノードのバイアスは 0.015 V で、最大トンネル電流に対応します。

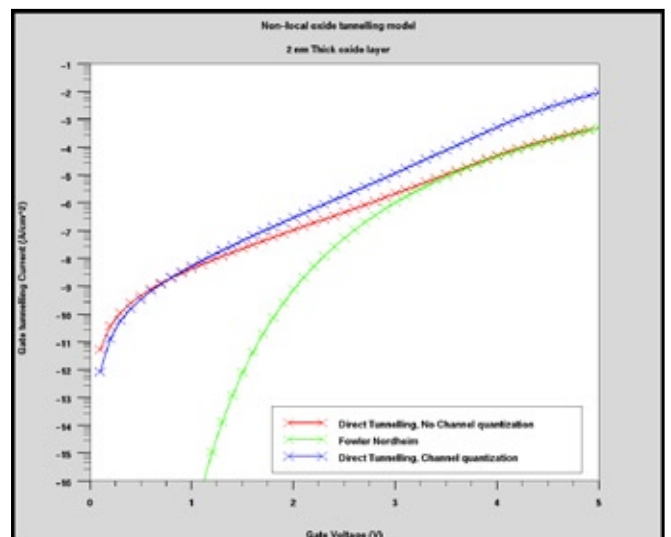


トンネル・ダイオードの電子シンク (n 型材料) とホール・シンク (p 型材料) を示しています。アノードのバイアスは 0.015 V です。

酸化膜トンネル・モデル

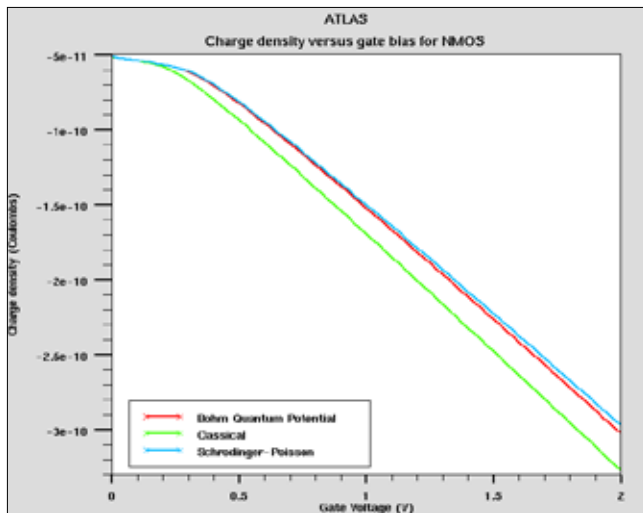
Quantum は、半導体チャネルから酸化膜を通るトンネル電流を計算するためのさまざまなモデルを備えています。モデルの中で最も高度なモデルは、透過行列法を用いてトンネル経路に沿ってシュレディンガー方程式を解き、エネルギーを統合します。シュレディンガー方程式の解に結合して、チャネルの量子化効果をオプションとして組み込むことができます。右図は、この高度なモデルを用いて計算したトンネル電流の例です。この例では、Fowler-Nordheim モデルの結果と比較しています。

アクセプタ・ドーピングしたチャネルと 2 nm の酸化膜厚を持つ MOS キャパシタのトンネル電流対ゲート電圧です。Fowler Nordheim モデルによる電流は高いバイアスで直接トンネル電流と一致します。また、チャネル量子化による直接トンネル電流も示しています。量子化による電荷の中央へのシフトは、直接トンネル電流をより高いバイアスで最も著しく増大させる主要な要因です。

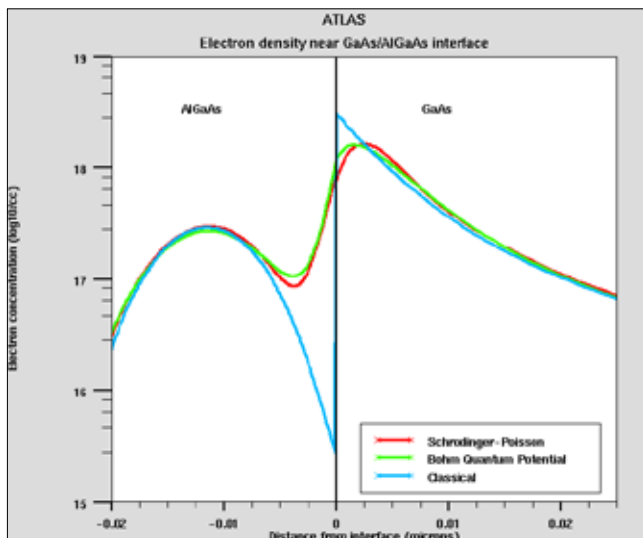


量子モーメント輸送モデル

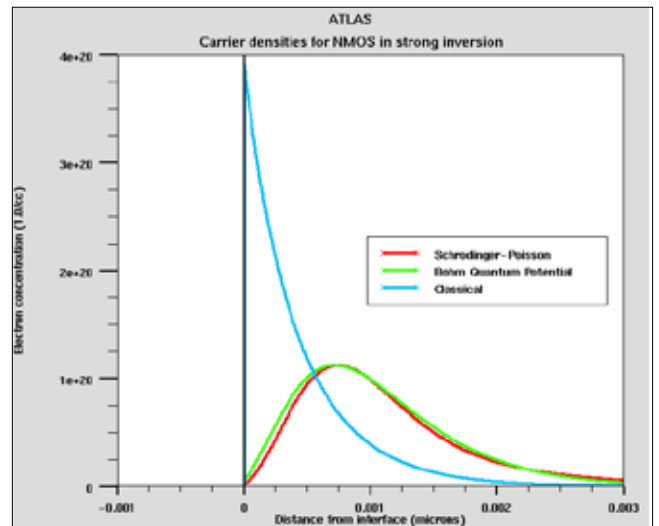
Quantum は、準古典的なドリフト拡散と流体キャリア輸送において量子閉じ込め効果を考慮します。ボーム量子ポテンシャル (Bohm Quantum Potential: BQP) モデルは、量子力学のボーム解釈をベースとする補助方程式を使用して、ポテンシャル・エネルギー項に依存する位置を計算します。ポテンシャル・エネルギーは、電子またはホール分布に大きく影響します。モデルは理論物理学をベースにしていますが、2つの合わせ込みパラメータを含む、いくつかの経験に基づく手法も保有しています。このフレキシビリティにより、材料物性の範囲内だけでなく、3次元においても、デバイスの異なるクラスの量子の振る舞いをモデルを使用して概算できます。電流フローが無視してよい程度であるという条件下で、シュレディンガー・ポアソン方程式の結果と BQP とは、ほぼ一致します。したがって、デバイス特性 (I-V 特性を含む) における量子閉じ込め効果は、より近似法としてシミュレートされます。



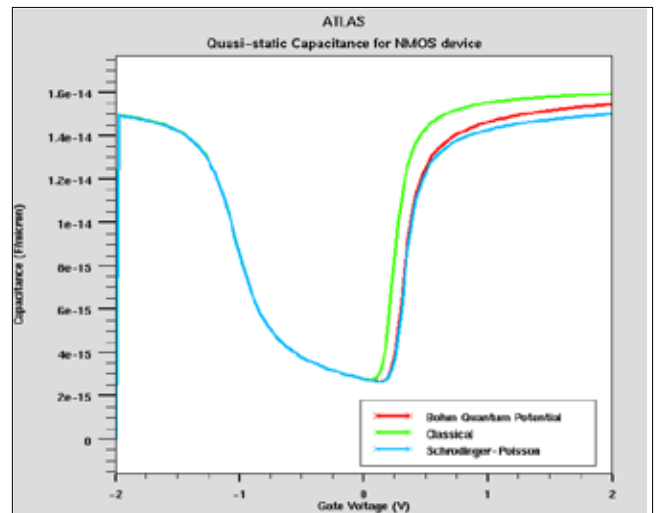
NMOS デバイス構造が反転状態になるにつれ、電子の総電荷はゲート電圧と共に増加します。BQP 値と S-P 値は相似であり、BQP モデルのパラメータをより最適化することにより、BQP 曲線を S-P 曲線にさらに近づけることができます。



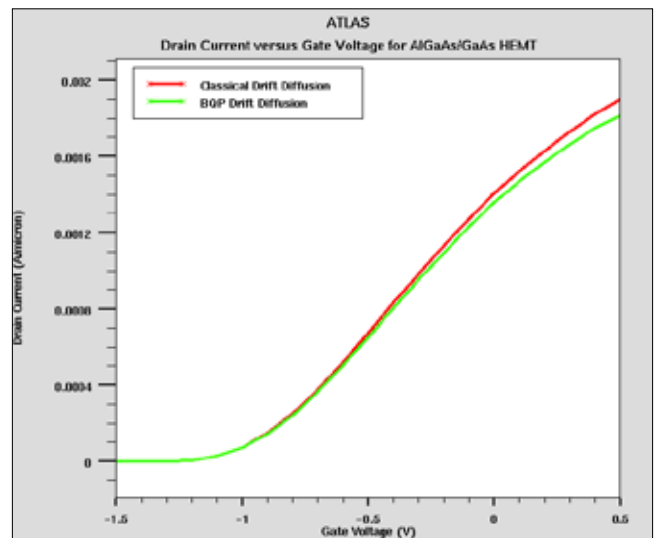
古典モデル、BQP モデル、S-P モデルにより計算された、HEMT 構造の AlGaAs/GaAs 界面近くの電子密度です。



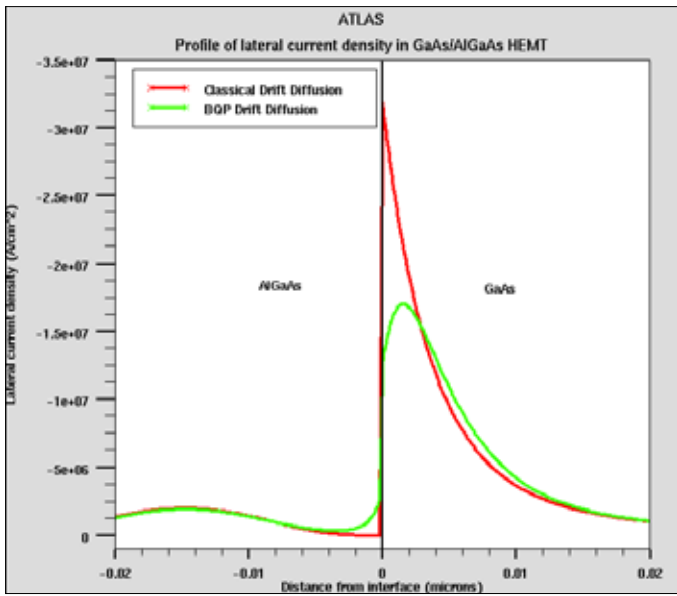
2 nm の酸化膜を持つ NMOS デバイス構造のゲート下の電子濃度。2 V のバイアスで強反転領域がデバイスに形成されました。BQP モデルのパラメータをより最適化することにより、BQP 曲線を S-P 曲線にさらに近づけることができます。



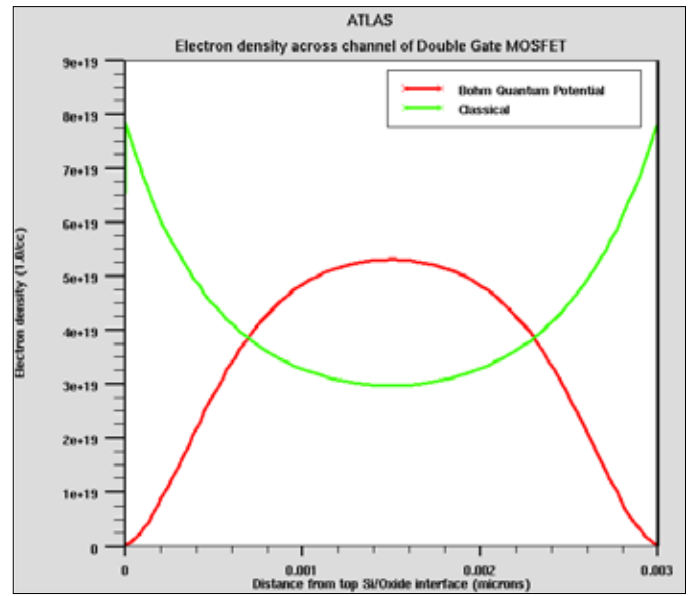
NMOS デバイス構造における準静的ゲート容量対ゲート電圧です。BQP モデルと S-P モデルを用いて量子閉じ込め効果による反転しきい値電圧を正確に予測することができます。この例では、電子に対してのみ量子効果を考慮しています。



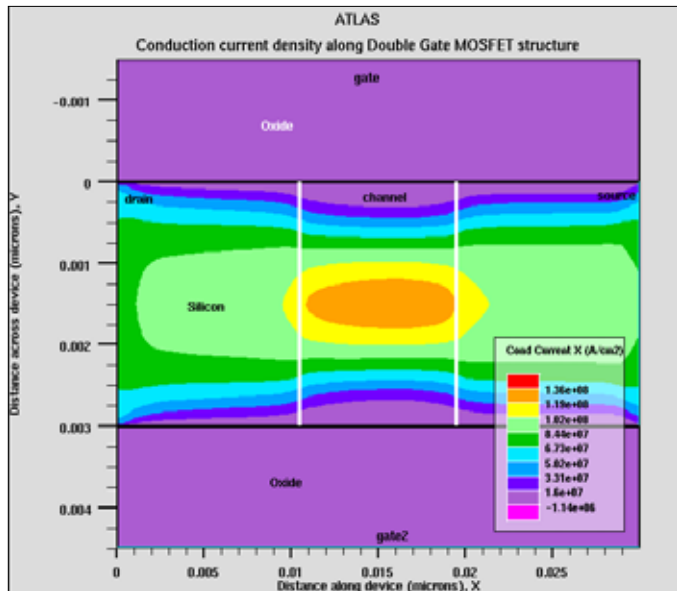
ドレインに 0.5V 印加時の HEMT 構造におけるドレイン電流対ゲート・バイアスです。この例では、量子閉じ込め効果によりドレイン電流が減少しました。この効果は使用する特定の移動度モデルに依存します。



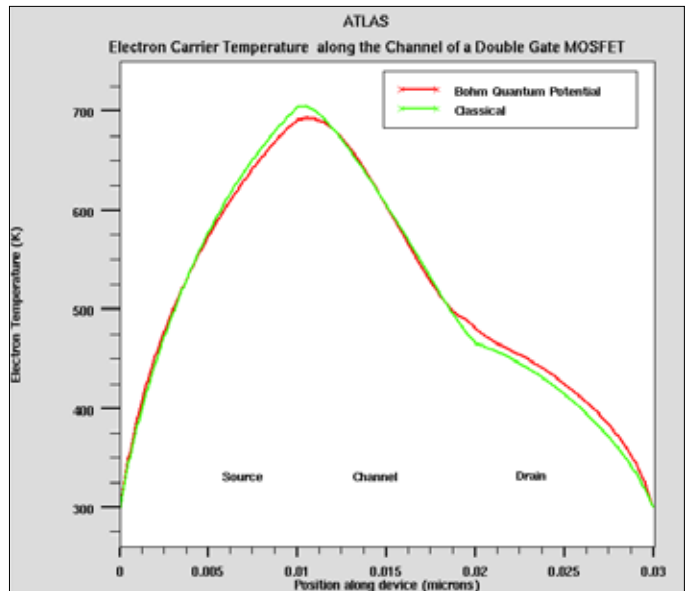
チャンネルに垂直な線に沿った、HEMT 構造の横方向の電流密度 (チャンネルに平行方向) です。ドレイン・バイアス、ゲート・バイアスは共に 0.5 V です。量子モデルでチャンネルの電流密度が滑らかになっているだけでなく、AlGaAs では伝導経路が平行になっていることがわかります。



ソースとドレインの間にある 3 nm 幅のチャンネル断面における電子密度です。ゲート・バイアス、ドレイン・バイアスは共に 0.5 V で、断面の位置におけるキャリア温度はおよそ 630 K です。量子閉じ込め効果が明らかです。



ゲート・バイアス、ドレイン・バイアス共に 0.5 V でのダブル・ゲート型 MOSFET 構造の伝導電流密度です。エネルギー・バランスとボーム量子ポテンシャル・モデルを使用しました。チャンネルの中央近くの電流濃度は量子閉じ込め効果の影響を受けています。



エネルギー・バランス・モデルを用いて得た、ダブル・ゲート型 MOSFET 構造における電子温度です。プロファイルは、左図に示した断面図に垂直な、ソースとドレイン間のデバイス構造に沿って得られました。従来のモデルとボーム量子ポテンシャル・モデルの結果は、キャリア分布では大きな変化が生じるにもかかわらず、温度分布ではわずかな差異を示しています。

SILVACO

株式会社 シルバコ・ジャパン
www.silvaco.co.jp

お問い合わせ : info@silvaco.co.jp

本社

〒244-0801
神奈川県横浜市戸塚区品濃町549-2
三宅ビル4F
TEL : 045-820-3000 FAX : 045-820-3005

京都サポートセンター

〒604-8152
京都府京都市中京区烏丸通 蛸薬師下ル手洗水町651-1
第14長谷ビル 9F
TEL : 075-229-8207 FAX : 075-229-8208