



半導体デバイスのシミュレーション

森 伸也

半導体デバイスの設計にはデバイスシミュレータが広く用いられている。現在、主流のシミュレータは、経験的なパラメータが多く必要である。筆者らは、経験的なパラメータを必要としない第一原理量子輸送デバイスシミュレータの開発を行っている。本稿では、半導体デバイスのシミュレーションについて、半導体、電界効果トランジスタ、シミュレータの構成などを説明したのち、第一原理量子輸送デバイスシミュレータの現状を紹介し、将来展望を述べる。

キーワード：半導体, トランジスタ, 集積回路, デバイスシミュレーション, 量子輸送

1 はじめに

最近、半導体という言葉がテレビや新聞などで見聞きする機会が多くなった。半導体から作られたデバイスは、現在、私達の身の回りのありとあらゆる所で使われている。スマートフォン、コンピュータなどの電子機器はもちろん、太陽電池、照明機器やディスプレイ、自動車や鉄道、現金自動預け払い機や電子決済端末、冷蔵庫・炊飯器などの家電製品や子供のおもちゃなど、日頃、私達がよく目にするものだけでなく、データセンターや通信基地局、発電所などの社会インフラ、さらには、地球を離れて、宇宙ステーションや人工衛星なども半導体デバイスに支えられている。筆者は、大学の卒業研究以来、一貫して、半導体の電子物性および半導体デバイスのモデリング・シミュレーションに携わってきた。本稿では、半導体デバイスのシミュレーションについて、基本的なことからはじめて、将来展望までを述べる。

2 半導体

半導体とは、辞書的な定義では、電気をよく通す金属などの導体と、電気をほとんど通さない絶縁体との中間的な電気伝導度を有する物質のこととされている。さまざまな物質の電気抵抗率(電気伝導度の逆数)を図1(a)に示す。代表的な半導体材料のシリコン(Si)

やゲルマニウム(Ge)などの抵抗率が、金属と絶縁体の中間的な値であることがわかる。しかし、単に電気

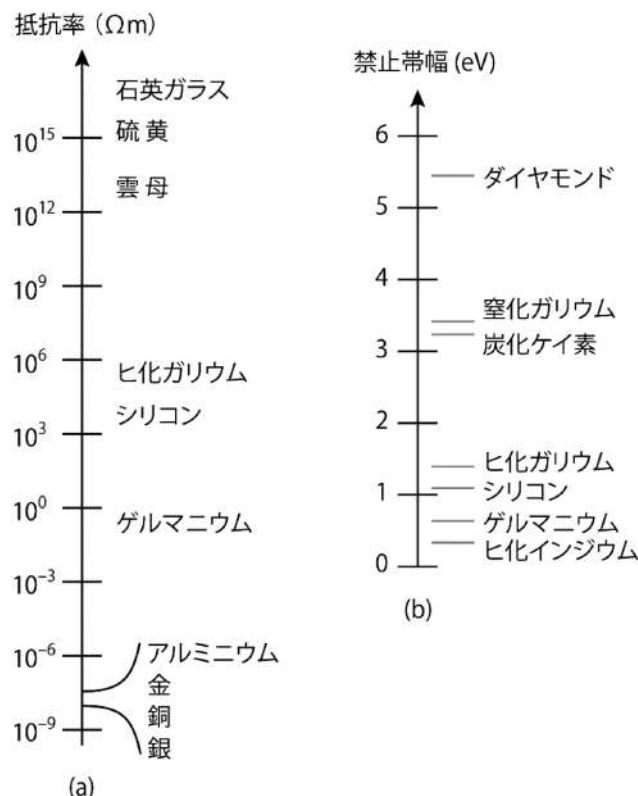


図1 (a) さまざまな物質の抵抗率^{1,2)}, および(b) さまざまな半導体の禁止帯幅³⁾

Simulation of Semiconductor Devices

Nobuya MORI 大阪大学 大学院工学研究科 電気電子情報通信工学専攻 教授 工学博士 (〒565-0871 大阪府吹田市山田丘 2-1)

を適度に通すだけでは、応用範囲は限られるはずである。半導体がこれほど多くの場面で用いられているのは、その電気伝導度が、電圧や温度など、外部からの刺激により、大きく変化することがひとつの要因である。この性質を利用して、半導体デバイスをうまく設計することで、スイッチやセンサーなどに応用できるようになる。

半導体中の電気伝導は、負の電荷を帯びた自由に動ける電子と後で述べる正の電荷を帯びた正孔とが担っている。この電子と正孔とはあわせてキャリアとよばれる。半導体では、半導体を構成する母体の原子とは異なる、いわゆる、不純物原子を外部から導入することができる。この不純物原子の個数分、キャリアの個数が変化し、電気伝導度が変化する。さらに、導入に際して、不純物を通さないマスクなどを利用することにより、不純物の導入量や原子種を、場所ごとに変えることもできる。この不純物ドーピング技術により、半導体中のキャリアの数を精密に制御できるようになる。これも半導体の優れた特徴のひとつである。

シリコンはIV族の原子である。このシリコンに、V族の原子、たとえば、リン(P)原子を不純物として導入すると、導入したリン原子の個数分、自由に動ける電子の数が増える。一方、III族の原子、たとえば、アルミニウム(Al)原子を1個導入すると、電子が1個不足することになる。この電子の孔が空いた状態は、半導体中では、正の電荷を持つ粒子のように振る舞う。この粒子が正孔である。電子が多く存在する半導体はn型、正孔が多く存在する半導体はp型とよばれる。n型、p型の2種類の半導体を作り分けることが可能なことも半導体の優れた特徴のひとつである。たとえば、n型半導体とp型半導体とを接合したデバイスであるダイオードは、p型側からn型側へは電気を通すが、逆向きには通さないという整流特性を示し、電源回路や検波回路などに応用されている。

図2(i)に模式的に示したように、電子と正孔とが半導体中で出会うと、結合して消滅してしまうことがある。このとき、もともと電子・正孔が持っていたエネルギーは、光や熱として放出される。光として放出する現象を利用することにより、発光ダイオードや半導体レーザーが実現されている。放出される光の色(波長)は、半導体材料ごとに決まっており、適切な材料を選ぶことにより、赤外から紫外にわたる広い波長範囲で、発光波長を変えることができる。2014年のノーベル物理学賞は「高輝度・低消費電力白色光源を実現可能にした高効率青色発光ダイオードの発明」に対して与えられた。この青色発光ダイオードには、窒化物

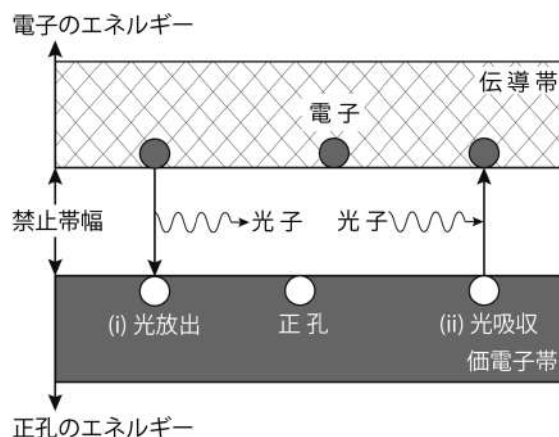


図2 半導体のエネルギーバンド図

横軸は場所、縦軸はエネルギー(電子に対しては上向きが正、正孔に対しては下向きが正)を表す。電子が自由に動ける伝導帯と正孔が自由に動ける価電子帯との間に、電子も正孔も存在できない禁止帯がある。(i) 電子と正孔とが結合して光子を放出する光放出過程と、(ii) 逆に光子を吸収して電子正孔対が生成する光吸収過程がある。

半導体が用いられている。

2023年のノーベル化学賞は「量子ドットの発見と合成」に対して与えられた。直径がナノメートルスケールの非常に小さい半導体微粒子が量子ドットとよばれる構造である。これぐらいサイズを小さくすると、量子力学的な閉じ込め効果により、半導体中における電子のエネルギー準位が変化し、発光波長も変化する。サイズが小さくなると発光波長が短くなる。このように、材料を変えることなく、粒子サイズによって発光波長を選ぶことができるのが量子ドットの特徴のひとつで、その性質を利用して、ディスプレイなどに応用されている。

半導体中では、図2(ii)に模式的に示したように、光子を吸収して電子正孔対が生成する過程も生じる。これにより、光のエネルギーを電気のエネルギーに変換することができる。この現象はスマートフォンのカメラや太陽電池などに応用されている。現在、大面積の太陽電池の多くは、発電層にシリコンが用いられているが、より優れた性質を持つ材料やデバイス構造の探索も続けられている。たとえば、近年、ペロブスカイトとよばれる結晶構造をとる半導体が、軽くて柔軟な太陽電池材料として注目されている。

半導体材料を特徴づけるパラメータの一つに、禁止帯幅もしくはバンドギャップとよばれるエネルギーの次元を持つ物理量がある。図2に示したように、自由に運動できる電子の最低エネルギー準位と正孔の最低エネルギー準位との差が禁止帯幅である。先に述べた発光の場合、放出される光子のエネルギーが禁止帯

幅と同程度になる。図 1(b) にさまざまな半導体の禁止帯幅を示す。シリコンの禁止帯幅は約 1 eV であり、ゲルマニウムやヒ化ガリウム(GaAs) など多くの半導体の禁止帯幅は 1 eV 前後にある。一方、近年、ワイドバンドギャップ半導体とよばれる、禁止帯幅がより大きな半導体材料が注目されている。窒化ガリウム(GaN) や炭化ケイ素(SiC) などがその代表例で、それらの禁止帯幅は 3 eV 以上ある。禁止帯幅が大きな半導体は、絶縁破壊電界が高い傾向にあるため、電力変換機器などに用いられるパワーデバイスへ応用することにより、機器の小型化・低消費電力化が実現可能となる。

半導体は、電圧印加により、電気伝導度を大きく変化させることができる。一方、金属の場合、自由に動ける電子の数が非常に多いため、外部から電界を印加しても、その影響は、金属表面の極めて薄い領域にしか及ばない。その結果、金属全体の電気伝導度はほとんど変化しない。しかし、原子層レベルの薄い金属を用意すれば、外部電界による電気伝導度の制御が期待される。この方針のもと、グラファイト表面から、セロハンテープを用いて 1 原子層を剥がし取り、それをチャンネルに持つトランジスタ(後述)とよばれるデバイスが実現された⁴⁾。単原子層のグラファイトはグラフェンとよばれ、2010 年のノーベル物理学賞「2 次元物質グラフェンに関する革新的な実験」の受賞対象となった。原子層 1 層もしくは数層からなる物質は、2 次元物質とよばれ、グラフェンの単離以降、単層の二硫化モリブデン(MoS₂) など多くの異なる 2 次元物質が見出され、デバイス応用に向けて、盛んに研究が進められている。

3 トランジスタ・集積回路

現在、最も数多く使われており、かつ、最も微細化が進んでいる半導体デバイスは、金属・絶縁体・半導体(Metal-Oxide-Semiconductor, MOS) から構成される電界効果トランジスタ(Field-Effect Transistor, FET) とよばれるデバイスである。シリコンから作られた多数の MOSFET を一枚の基板上に集積した回路が、コンピュータの中央処理装置(Central Processing Unit, CPU)などに用いられている。トランジスタは、1948 年に、米国ベル研究所のバーディーン、ブラッテン、ショックレーらによって発明された。彼らは、「半導体研究とトランジスタ効果の発見」の業績により 1956 年のノーベル物理学賞を受賞している。この最初のトランジスタはゲルマニウム点接触型トランジスタとよばれるデバイスであり、現在の MOSFET とは

異なる材料・構造である。

MOSFET の模式図を図 3 に示す。MOSFET には、電気伝導に関与するキャリアが電子である n チャンネル MOSFET と、正孔である p チャンネル MOSFET の 2 種類の構造がある。図 3 は、シリコンで作られた n チャンネル MOSFET の例である。中央のチャンネル領域は、不純物濃度があまり高くない p 型シリコンであり、その上に、二酸化ケイ素(SiO₂) などの絶縁膜があり、さらにその上にゲートと呼ばれる金属が乗っている。チャンネルの左右には、不純物濃度が高い n 型シリコンの領域がある。片方がソース、もう片方がドレインと呼ばれる。ソース・ドレイン領域は n 型であり、多数の電子がいる。しかし、チャンネル領域は p 型であり、ゲートに電圧を印加していない状態では、自由に動ける電子がほとんどいない。そのため、ゲート・ソース間を電流は流れない。この状態はオフ状態とよばれる。一方、図 3(b) に示したように、ゲートに正の電圧を印加すると、それに引き寄せられて、チャンネル領域に電子が誘起され、ソース・ドレイン間が繋がり、電流が流れるようになる。この状態はオン状態とよばれる。このように、MOSFET は、ゲート電圧によりオン・オフするスイッチのように働く。この機能を利用して多数の MOSFET を組み合わせることにより、論理演算回路などを実現できる。このような回路を一枚の基板上で実現したものは集積回路とよばれ、2000 年のノーベル物理学賞の受賞対象の一部「集積回路の発明への貢献」となった。

MOSFET は、比較的簡単な構造をしている。さらに、微細化の指針を与える比例縮小則と呼ばれる考え

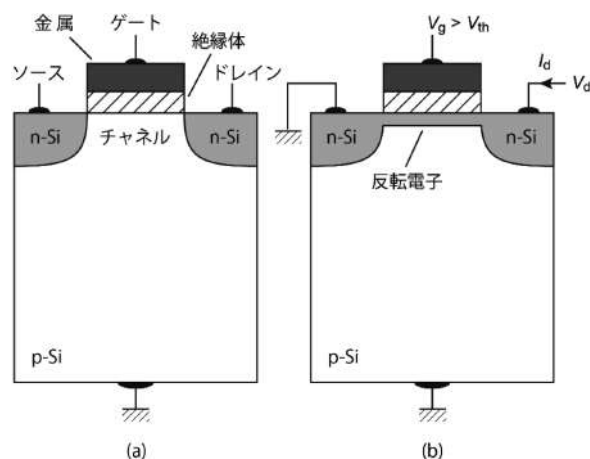


図 3 MOSFET の模式図

(a) n チャンネル Si MOSFET の断面図(図 5(a)も参照)。チャンネル領域に自由に動ける電子はない。(b) ゲートにしきい値電圧 V_{th} より高い電圧を印加すると、チャンネル領域に電子(反転電子とよばれる)が誘起されオン状態となる。

方もあり、これまで精力的に微細化が進められてきた。半導体デバイス中の電子・正孔の流れは、デバイス中における電界分布で決まる。その電界分布は、電磁気学のポアソン方程式に支配される。基本的な比例縮小則は、このポアソン方程式の形から導かれる考え方である。あるサイズのトランジスタが正しく動作したとする。そのデバイスのサイズを半分にしたとき、動作電圧・動作電流を半分、不純物濃度を倍にすれば、ポアソン方程式の形は元の大きなデバイスの場合と等価であることがわかる。そこで、この小さなデバイスも正しく動作するはずだと考える。

現実の微細化では、たとえば、回路設計側の要請から動作電圧を下げるのが難しいとか、基板表面に垂直な深さ方向のサイズは、イオン注入の条件などで決まるため、短くすることが困難などの技術的な課題により、単純な比例縮小則にしたがう微細化は難しい。しかし、そのような多くの課題を解決することにより、MOSFETの微細化が成し遂げられてきた。MOSFETの大きさの目安に、ソース・ドレイン方向に測ったゲート領域の長さであるゲート長がある。図4に示したように、ゲート長は、1990年頃には1 μm程度であったが、2000年頃には100 nmを切り、現在は10 nm程度になっている。このように極度に微細化が進んだ結果、図3および図5(a)に示したような平面型とよばれるデバイス構造では、ゲート電圧によるチャンネル領域の制御を正しく行うことが困難となり、現在は、図5(b)に示したようなFin状のチャンネルを有するFinFETとよばれるデバイス構造が作られている。さらに微細化を進めるために、図5(c)に示した、FinFETのチャンネルの一部を抜いたようなナノシートとよばれる構造が開発されている。

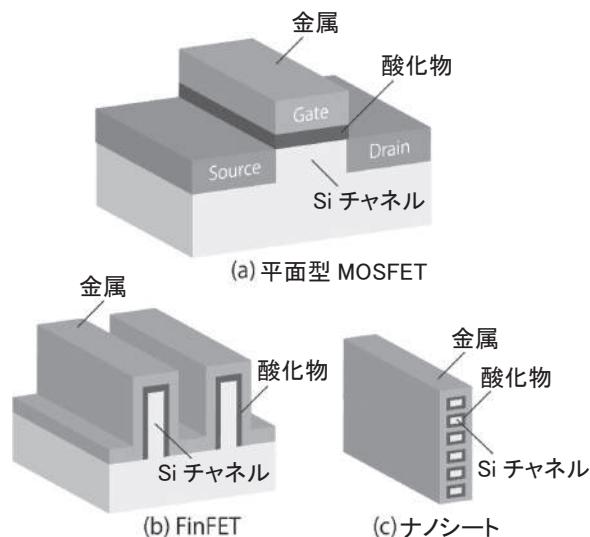


図5 MOSFET構造の変遷

(a) 従来の平面型、(b) 現在のFinFET、(c) 次世代のナノシート構造。FinFETおよびナノシートのソース・ドレインは、図の斜め前後方向にあり、図には描かれていない。

4 デバイスシミュレーション

半導体デバイスの設計には、デバイスシミュレータと呼ばれるソフトウェアが用いられている^{6,7)}。MOSFETなどの電子デバイスの設計に用いられるデバイスシミュレータは、図6のような構成になっている。デバイスの幾何学的な構造、デバイス内部の不純物分布、および外部から与える電圧などのバイアス条件を入力し、電流電圧特性などのデバイスの応答やキャリア分布などの内部情報を出力する。デバイスシミュレータの内部では、輸送方程式とポアソン方程式とを連立させて解いている。

キャリアは、電界分布にしたがって運動する。与えられた電界分布のもとで、どのようにキャリアが運動し、その結果、デバイス内部で、キャリアがどのように分布するのかを、輸送方程式を解き求める。一方、与えられたキャリア分布のもとで、どのような電界分布になるかは、ポアソン方程式を解くことにより求める。以上のように、輸送方程式とポアソン方程式の入力・出力は互いに逆の関係にあるため、二つの方程式を連立させて解く必要がある。

電子は、量子力学にしたがって運動する。また、波のような性質も示し、その波長が、電子の運動を特徴づける。半導体中の電子は、熱エネルギー程度の運動エネルギーを持って運動している。その熱エネルギーに対応する電子の波長が熱波長である。図4に示したように、シリコンの伝導電子の熱波長は10 nm程度

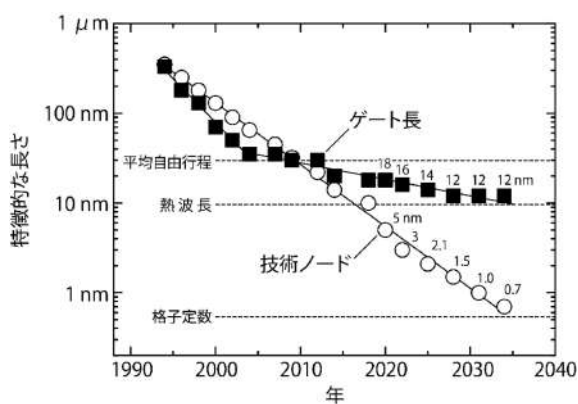


図4 Si MOSFETのゲート長の推移と将来予想⁵⁾

黒四角が、ゲート長を表す。比較のため、シリコンにおける電子の平均自由行程と熱波長および格子定数の値を破線で示した。白丸で示した技術ノードは、製造プロセスの技術世代を表す呼び名。

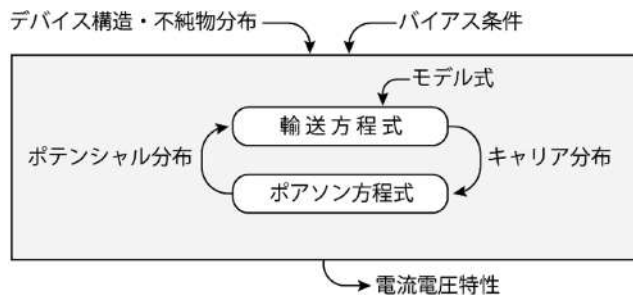


図6 デバイスシミュレータ

である。デバイスのサイズが熱波長より十分大きい場合は、電子を古典力学(ニュートン力学)にしたがって運動する粒子と近似できる。それゆえ、従来のデバイスシミュレータでは、輸送方程式として、気体分子の運動を記述する際に考案されたボルツマン輸送方程式が用いられてきた。現在も、産業界で利用されているシミュレータの多くは、ボルツマン輸送方程式を基礎としたものである。

ボルツマン輸送方程式を直接解く計算手法、たとえば、モンテカルロ法などは計算負荷が大きいため、産業界では、ボルツマン輸送方程式をモーメント展開して導出される、流体モデルとよばれるモデルに基づく計算手法が広く用いられている。特に、ドリフト拡散とよばれるモデルが最も多く用いられている。ドリフト拡散モデルでは、キャリアの移動度が重要なパラメータの一つであり、移動度をうまくモデル化することにより、複雑なキャリアの挙動を表現することができる。なお、ボルツマン輸送方程式は、熱波長より小さいデバイス構造における輸送現象など、量子力学的な影響を無視できない領域を、原理的には扱うことができないが、適切なモデル化や実測値とのキャリアレーションなどを行うことにより、現在もデバイス設計に広く用いられている。

5 量子輸送デバイスシミュレーション

図4に示したように、2000年ぐらいから、MOSFETのゲート長が伝導電子の平均自由行程に近づいてきた。その頃から、量子力学的な輸送方程式に基礎をおく量子輸送デバイスシミュレータの開発が大学などの研究機関を中心に始まった。2001年に米国パデュー大学のグループから、非平衡グリーン関数法(注1)とよばれる量子輸送方程式に基づくデバイス解析の結果が報告された⁸⁾。筆者らのグループも、2004年に開始された半導体理工学研究センター(STARC)のプロジェクト「ゲート長10nm世代を見据えた量子輸送デ

バイスシミュレータの開発」から、STARC「量子輸送シミュレータを用いた新構造・新材料デバイスの性能予測」、科学技術振興機構・CREST「原子論から始まる統合シミュレータ開発」、文部科学省・ポスト「京」プロジェクト「新材料からの量子論デバイス創製シミュレータ開発」、文部科学省・「富岳」成果創出加速プログラム「省エネルギー次世代半導体デバイス開発のための量子論マルチシミュレーション」などの支援を受けて量子輸送デバイスシミュレータの開発を行ってきた^{9,10)}。

デバイスを連続体として扱い、電子状態を半経験的なモデルで記述した、非平衡グリーン関数法に基づく量子輸送デバイスシミュレータをはじめに開発した。つづいて、デバイスを原子論モデルで扱うシミュレータを開発し、その後、電子状態を実空間密度汎関数理論で記述した第一原理量子輸送デバイスシミュレータの開発に着手した。量子輸送方程式に基づくシミュレータは、古典的な場合と比べて、さらに多くの計算資源が必要になるため、高速計算手法の開発が重要な課題である。筆者らは、R行列法^{11,12)}および等価モデル^{13,14)}という計算手法を開発し、高速な量子輸送デバイスシミュレータを実現した。原子論に基づく量子輸送デバイスシミュレータは、現在、他の研究機関でも開発されているが、それらの多くのプログラムで等価モデルが用いられている。

非平衡グリーン関数法デバイスシミュレータでは、電子の運動状態を表すグリーン関数を、通常、行列で表現する。グリーン関数を表す行列を求めるためには、大規模な逆行列演算が必要となり、それが計算のボトルネックとなる。R行列法では、デバイスを小さな部分系に分割して、各部分系のR行列を順に伝搬することにより系全体のR行列を求め、それからグリーン関数を求める。一方、グリーン関数行列のサイズは、電子の状態を記述する基底系のサイズで決まる。原子論に基づく基底系は、価電子帯深くの低い電子エネルギー領域から、伝導帯上部の高い電子エネルギー領域までの非常に広いエネルギー範囲を記述できる。しかし、電子デバイスでは、禁止帯付近の狭いエネルギー範囲のキャリアのみが電気伝導に関与する。そこで、原子論に基づく基底系から、伝導に関与する部分系を抽出し、グリーン関数行列のサイズを縮小したモデルが等価モデルである。

実デバイスの電流電圧特性とそのシミュレーション結果との比較の例を図7に示す。東北大学・遠藤哲郎教授のグループが開発した縦型ナノワイヤトランジスタの実測値¹⁵⁾と、有効質量近似に基づくシミュレー

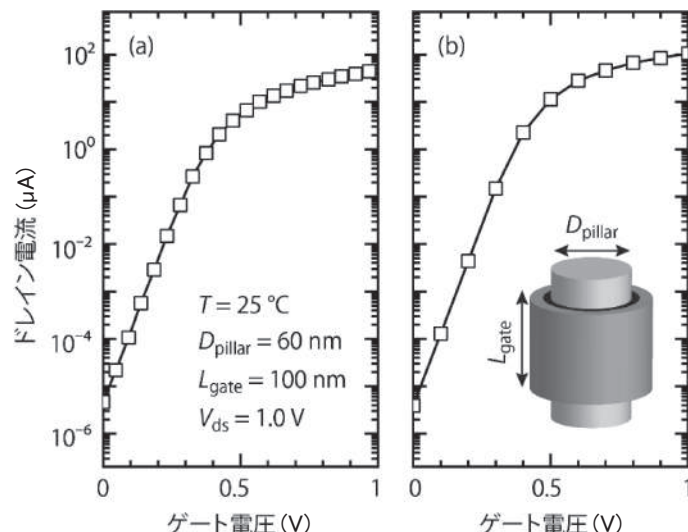


図7 縦型ナノワイヤトランジスタの伝達特性の実測値¹⁵⁾(a)とシミュレーション結果(b)との比較

タを用いた計算結果とを比較している。調整パラメータを含まないシミュレーションが、測定結果を概ね良好に再現することがわかる。なお、図7(b)の計算結果は、散乱過程を考慮しない弾道輸送条件のもとで行っているため、オン電流を若干多く見積もっている。結晶原子の熱振動による散乱などを考慮することにより、オン電流が減少する。

6 おわりに

現在、第一原理量子輸送デバイスシミュレータは、プロトタイプが完成した段階であり、集積回路の設計などに応用するためには、さらなる計算高速化、プロセスシミュレータや回路シミュレータなどとの接続、熱輸送シミュレータなどとの連立に向けたマルチフィジックス化などが必要である。

物質科学の分野では第一原理計算が広く用いられるようになり、経験的なパラメータなしに、種々の材料の物性を高い精度で予測できるようになってきた。商用でないソフトウェアもいくつも公開されており、あまり複雑な物質でなければ、パーソナルコンピュータ(PC)でも実行できる。筆者らが開発した第一原理量子輸送デバイスシミュレータは、まだそのような段階にはない。今後、さらなる高速計算手法の開発やモデル化を進めることにより、PC上で現実的なデバイスの性能予測を手軽に行える環境の構築を目指す。

一方、現在のPCは、ドリフト拡散シミュレータを走らせるのに十分な性能を有しており、手軽にシミュレーションを実行できるようになってきた。近年、半導体技術者不足が問題になっているが、デバイスシ

ミュレータは、半導体デバイスの教育に最も効果的なツールのひとつであると言える。半導体デバイスの教科書には典型的な電流電圧特性などが少数載っているだけである。一方、デバイスシミュレータを用いれば、バイアス条件やデバイス構造・不純物分布などを变化させたときに、どのようにデバイス特性が変化するかを自由に試すことができる。また、多くのシミュレータは可視化プログラムと接続されているため、キャリア分布などのデバイス内部の情報を、文字通り、見るができる。そのため、デバイスシミュレータを併用すれば、半導体デバイスの教科書のみで学んでいる場合と比べて、半導体デバイス動作の理解がより深まると考えられる。

注

(注1) グリーン関数は、物理や工学の多くの分野で、微分方程式や偏微分方程式の解を求めるときに利用されている。ポアソン方程式は、 ϵ_0 を誘電率として、

$$\nabla^2 \phi = -\frac{1}{\epsilon_0} \rho \quad (1)$$

と表され、ポテンシャル ϕ を2階微分すると電荷密度 ρ が得られる形をしている。しかし、応用上は、 ρ を与えたときの ϕ が知りたいことがよくある。そのような場面では、次の式のように、 ρ から ϕ が直接得られる式の方が便利である(以下は形式的な式で、 $g\rho$ は単純な積ではない)。

