

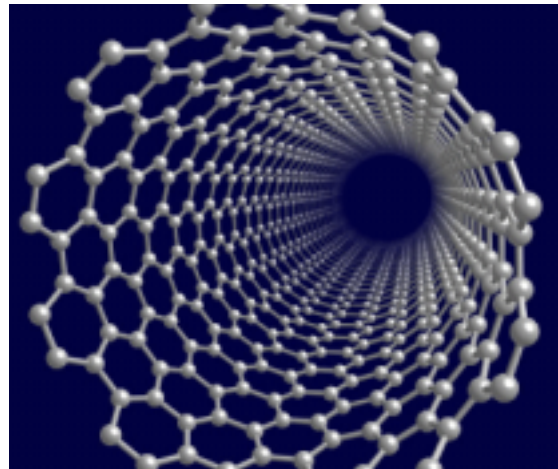
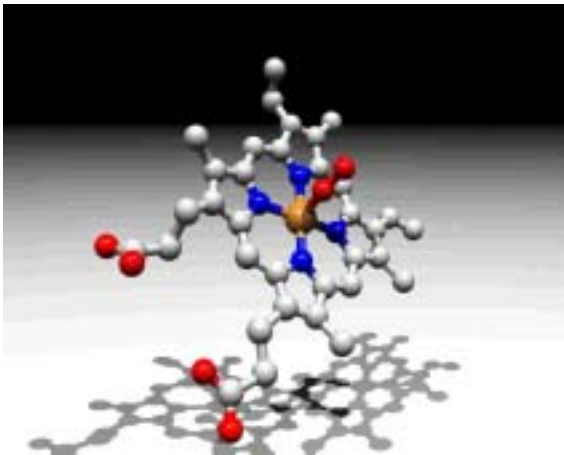
実空間密度汎関数法によるSiナノ構造体 の大規模電子状態構造計算

筑波大学計算科学研究センター
岩田潤一



物性・材料科学における 第一原理計算

- ・ 電子の運動を支配する量子力学の基礎原理のみに立脚
 - ・ 原子核の運動 古典論、電子の運動 量子論
- ・ 経験的パラメータを一切含まない計算
 - ・ 密度汎関数理論 (W. Kohn, 1998年ノーベル化学賞)
- ・ 安定構造、電気伝導、光応答などを予測・解明する
 - ・ しかも定量性がある



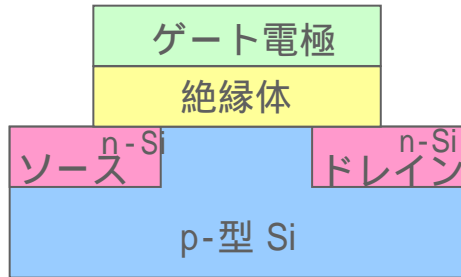


Contents

- ・ Siナノワイヤが注目されている
- ・ ナノワイヤデバイス設計には大規模電子状態計算が必須
- ・ 超並列計算機を駆使した第一原理計算手法の開発（DFT, 実空間法, $O(N^3)$ ）
- ・ 数nm径Siナノワイヤの電子状態（数10原子～10,000原子超）

これまでのLSIの進化を支えた微細化の限界と 新構造トランジスタの必要性

従来型（プレーナ型）FET（電界効果トランジスタ）

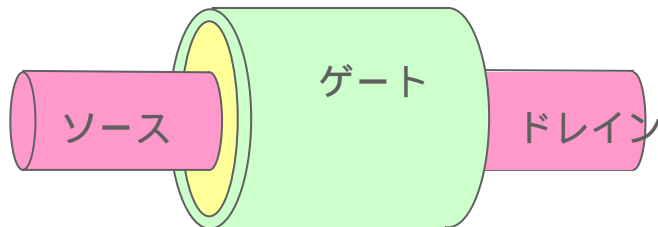


これまでLSIの高性能化・省電力化・高集積化はFET（電界効果トランジスタ）の微細化によって実現されていた

しかしながら微細化を押し進めるLSIの発展は2020～2030年に終焉を迎えると予想されている。

微細化に伴い漏れ電流増大 LSIの消費電力の大部分を占める

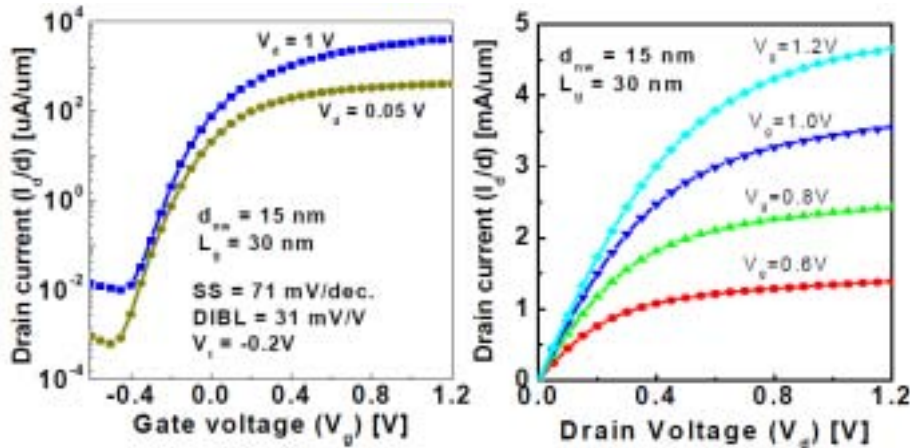
漏れ電流抑制のため新しい構造のトランジスタが模索されている。
中でもシリコンナノワイヤFETは究極の構造であると有力視されている。



ナノ 量子力学に支配される世界

シリコンナノワイヤFETの解析・設計には量子力学的第一原理計算が不可欠

シリコンナノワイヤFET



(Samsung, IEDM Technical Digest 2005)

漏れ電流抑制（低消費電力）はもちろん、非常に良好なデバイス特性も示す

微細化終焉後の電子デバイスとして最も有望視されている

ただし「微細化」すれば高性能化・省電力化・高集積化が実現されるという、これまでのようなシンプルなデバイス設計指針が存在しない

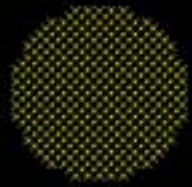


量子力学的シミュレーションに基づくデバイス設計指針の作成

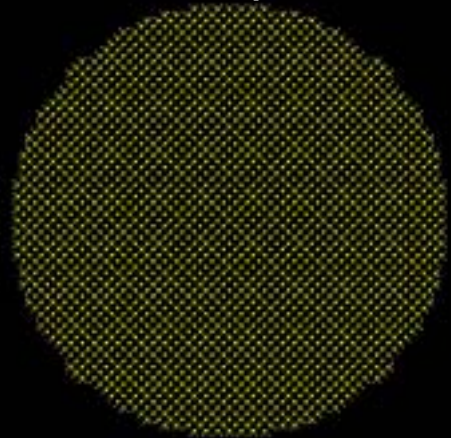
大規模第一原理計算が必要不可欠な中核技術

シリコンナノワイヤの断面(100)と原子数(ワイヤ軸方向の周期はSiの格子定数, H終端)

断面直径 4 nm
(425 原子)



断面直径 10 nm
(2341 原子)



断面直径 20 nm
(8941 原子)



断面サイズ10 nm ~ 20 nm 辺りが
実用になると目されている

実空間密度汎関数法コードによる超並列大規模第一原理計算

- ✓実空間差分法(J. R. Chelikowsky et al 1994)
- ✓疎行列
- ✓FFTが要らない(平面波コードでは必須)
- ✓MPI (Message Passing Interface) libraryを使用
- ✓バンド&k点 (固有関数のindex) 並列化

J. -I. Iwata et al., J. Comp. Phys. 229, 2339 (2010)

3D grid is divided by several regions for parallel computation.

KS 方程式 (finite-difference eq.)

$$\left(-\frac{1}{2} \nabla^2 + v_s[\rho](\mathbf{r}) + \hat{v}_{nloc}^{PP}(\mathbf{r}) \right) \phi_n(\mathbf{r}) = \varepsilon_n \phi_n(\mathbf{r})$$

Higher-order finite difference

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_n(x, y, z) \approx \sum_{m=-6}^6 C_m \psi_n(x + m\Delta x, y, z)$$

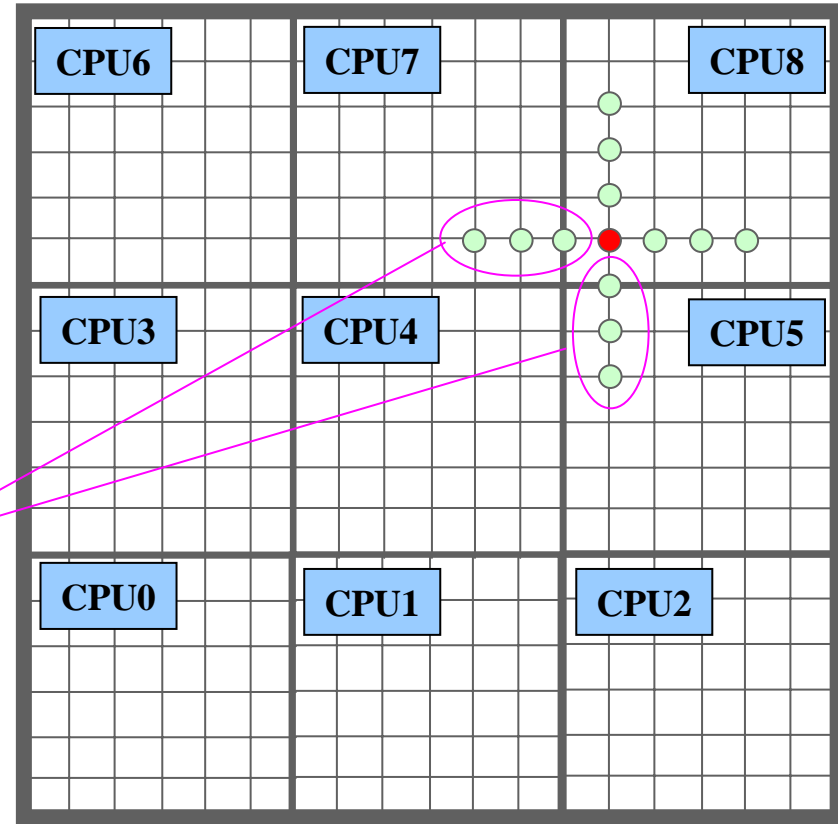
MPI_ISEND, MPI_IRECV

(隣接通信)

Integration

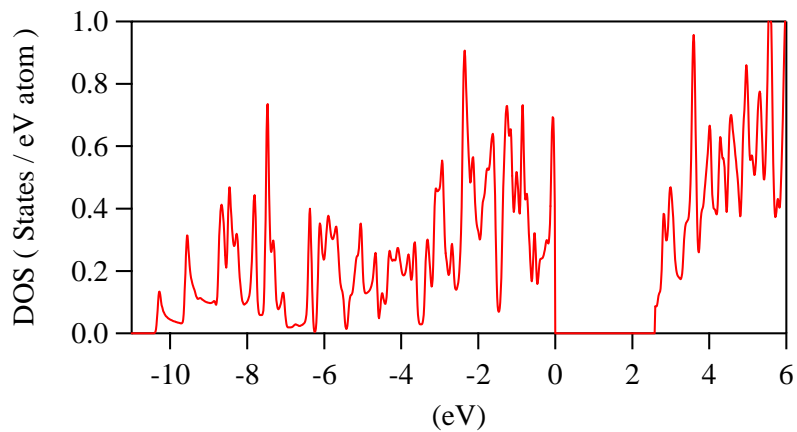
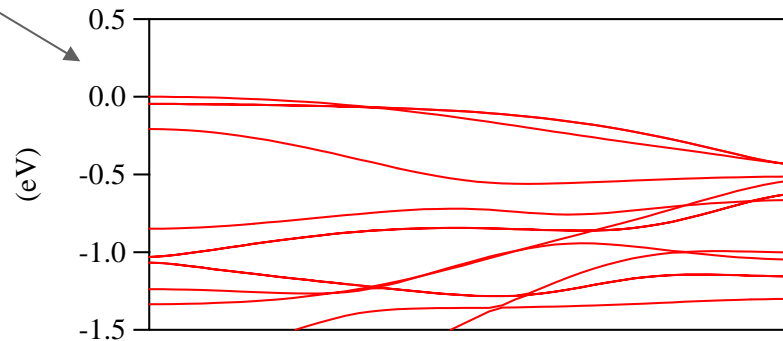
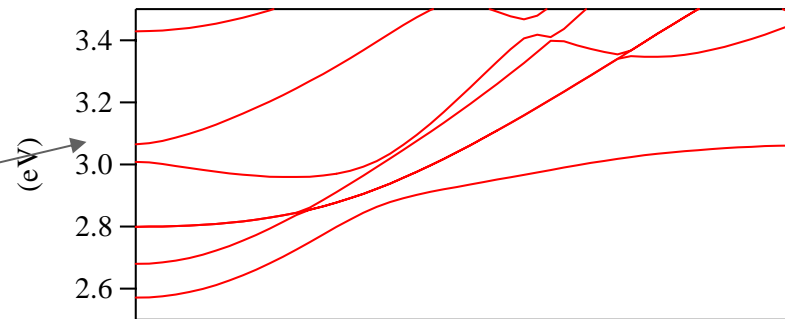
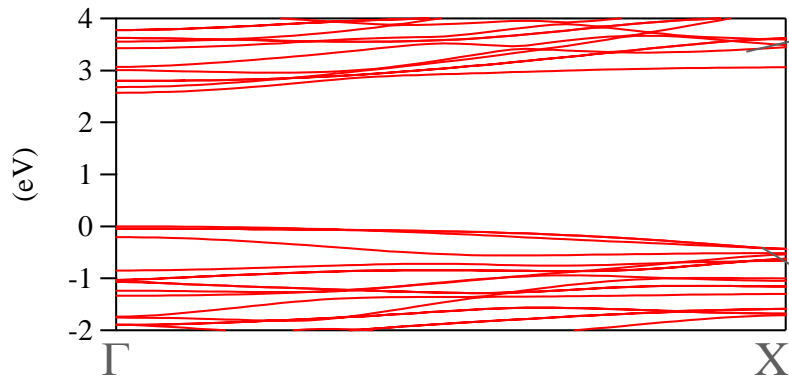
$$\int \psi_m(\mathbf{r}) \psi_n(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \approx \sum_{i=1}^{Mesh} \psi_m(\mathbf{r}_i) \psi_n(\mathbf{r}_i) \Delta x \Delta y \Delta z$$

MPI_ALLREDUCE



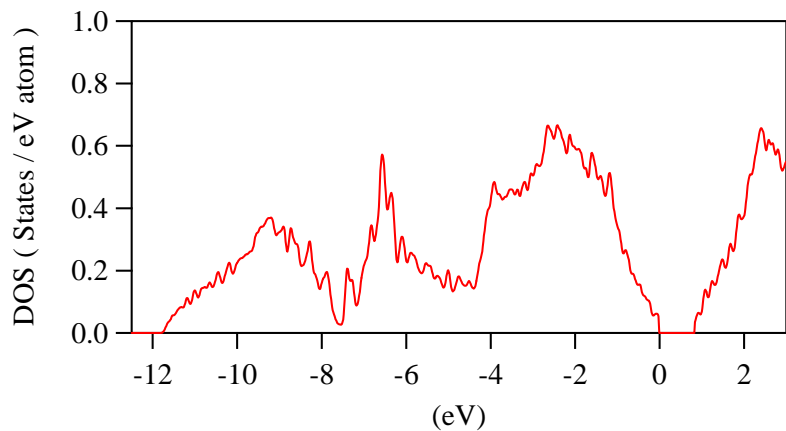
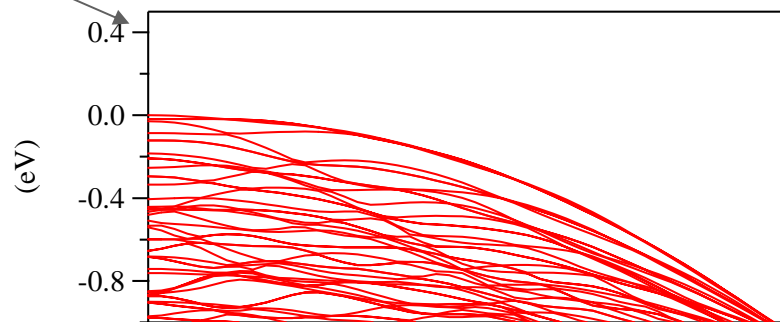
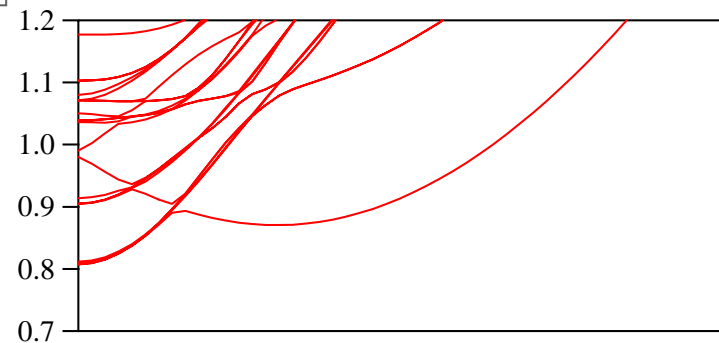
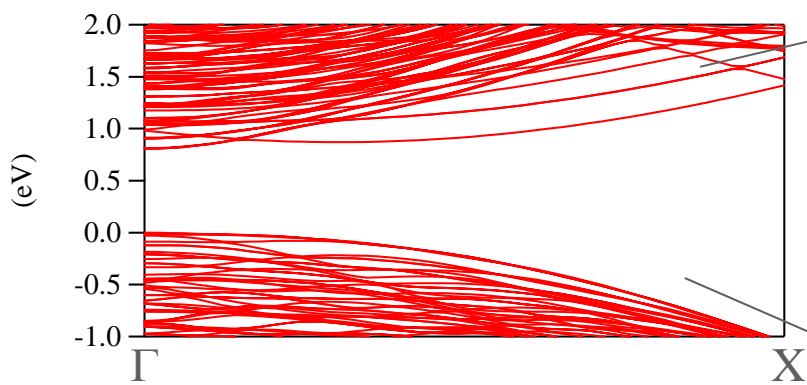
LDA, ノルム保存擬ポテンシャル
メッシュサイズ: 0.45 (~14Ry)
格子点数: 100,000 ~ 1,000,000

Band Structure and DOS of SiNW (d=1 nm)



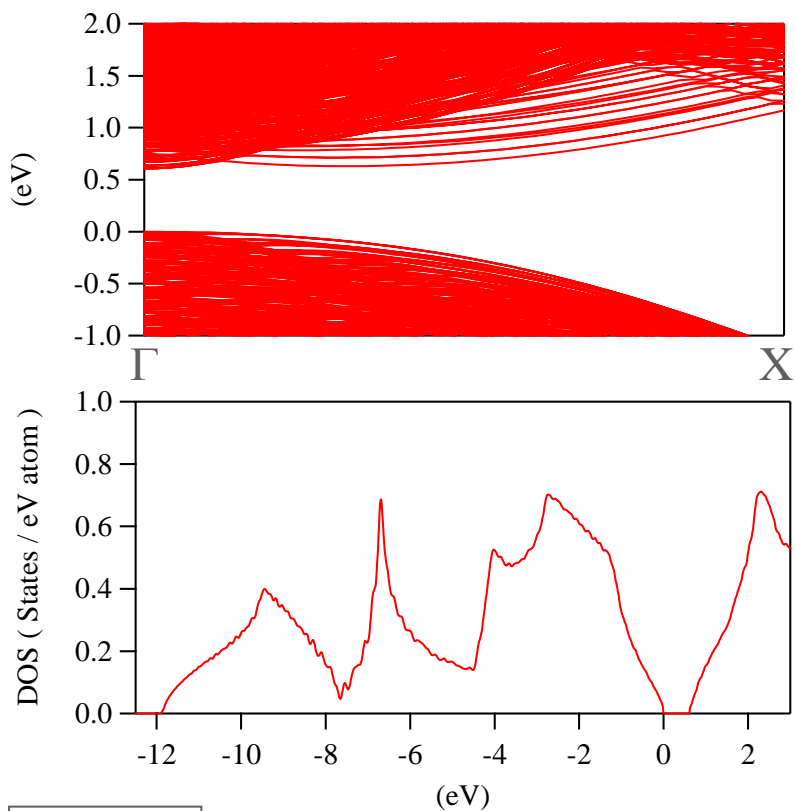
d=1 nm
Si₂₁H₂₀ (41原子)
E_g=2.60eV (LDA Bulk : 0.53eV)

Band Structure and DOS of SiNW (d=4nm)

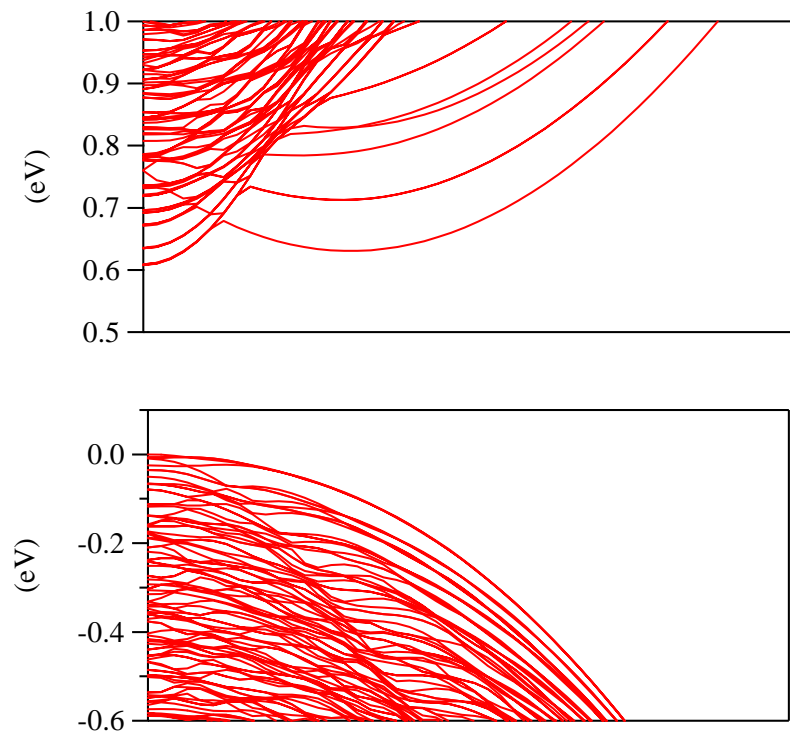


d=4nm
Si₃₄₁H₈₄ (425原子)
E_g=0.81eV (LDA Bulk=0.53eV)

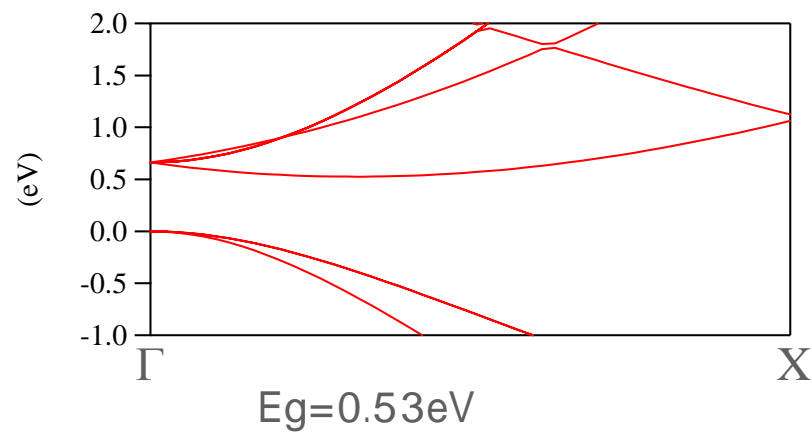
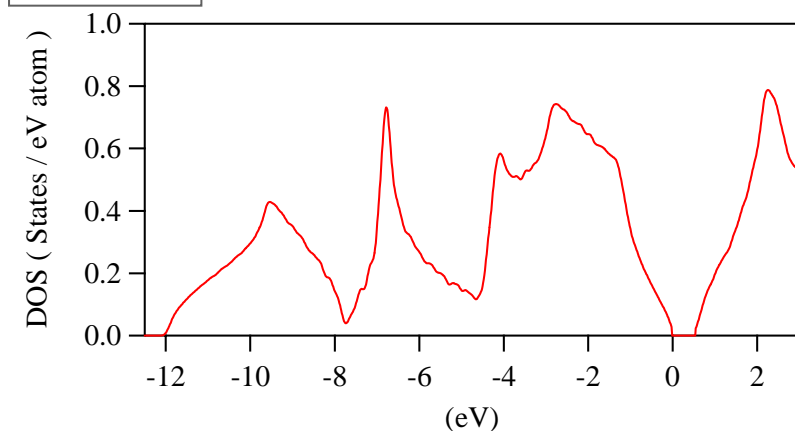
Band Structure and DOS of SiNW (d=8nm)



Si1361H164(1525原子), $E_g=0.61\text{eV}$

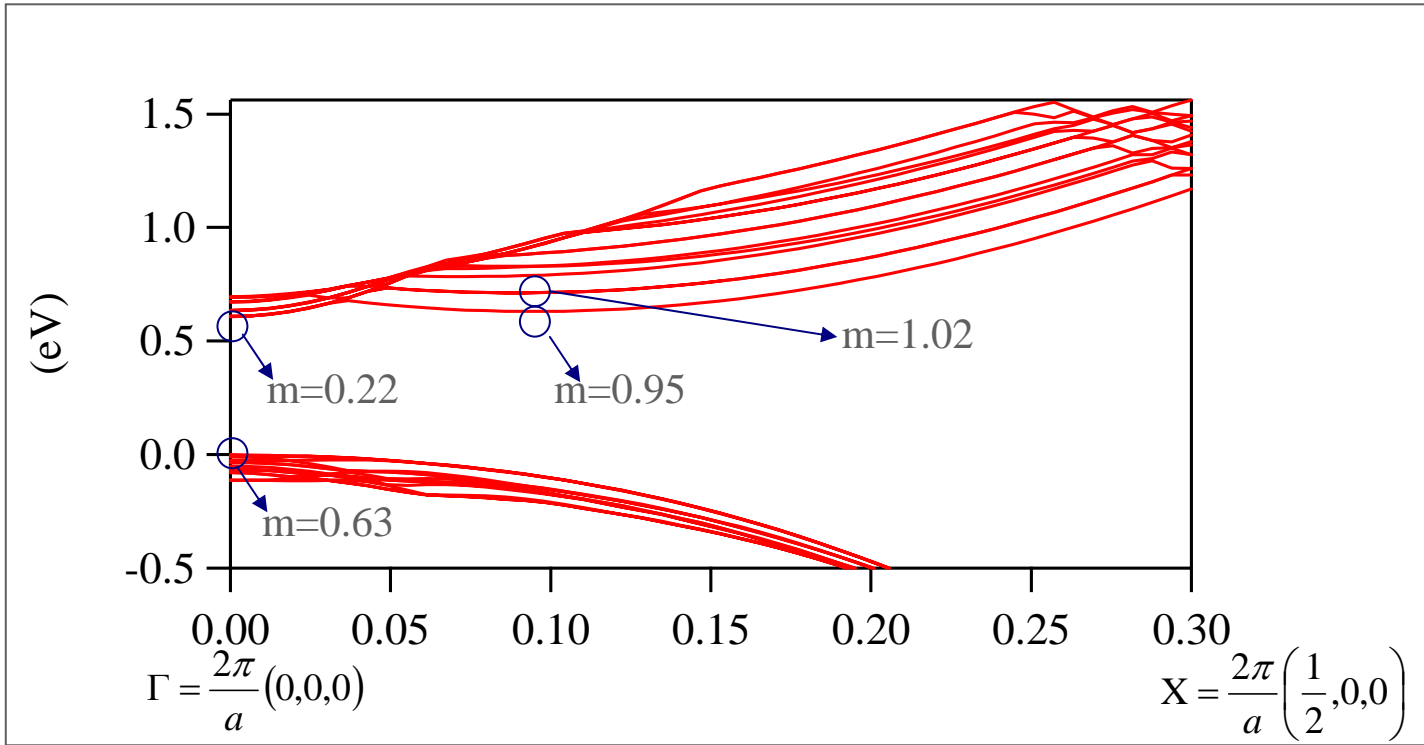


Bulk Si

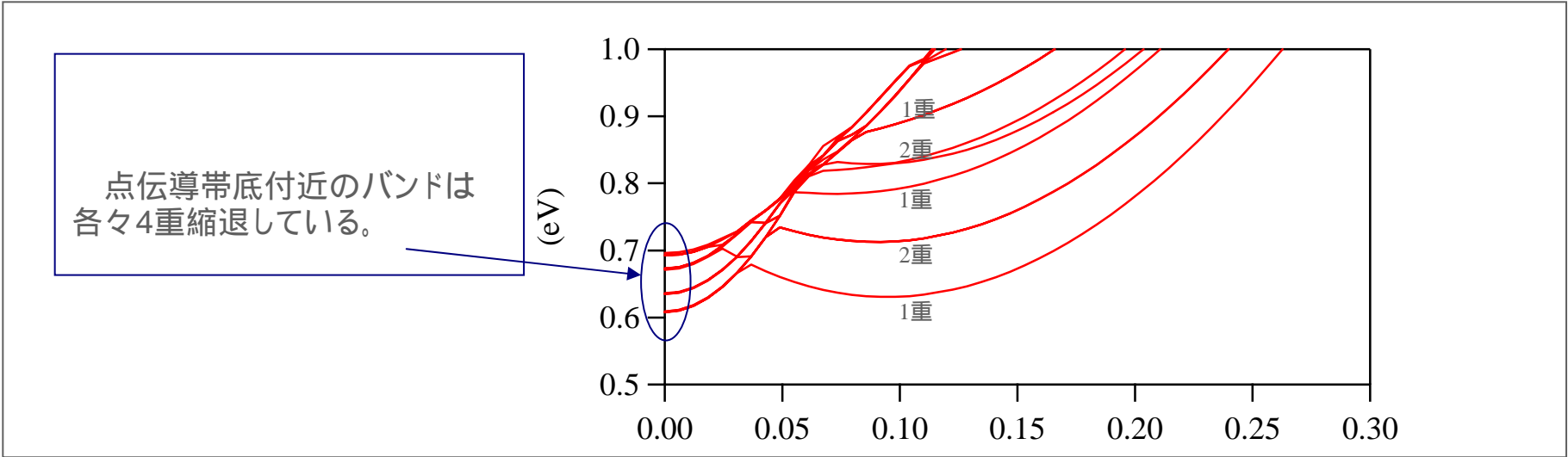


8nm Si nanowire : band and effective mass

- Band gap energy :
 $E_g=0.608\text{eV} (@\Gamma)$
 $E_g=0.631\text{eV} (@\text{CBM})$



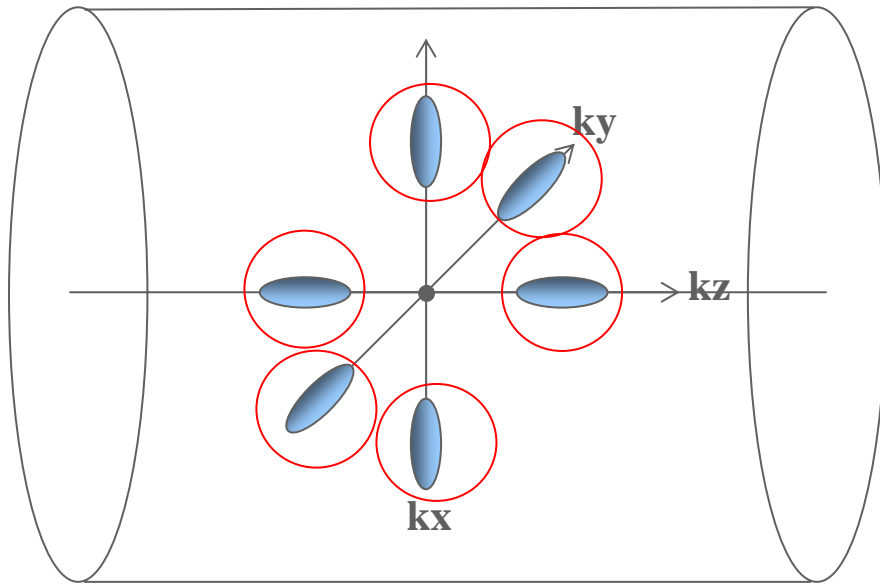
伝導帯の有効質量はバルクとほとんど同じ



点伝導帯底付近のバンドは各々4重縮退している。

有効質量近似による解析

円柱に閉じ込められた自由電子



円筒座標系での有効質量方程式

kz方向

$$\varepsilon'(\mathbf{k}) = \varepsilon_{CBM} + \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2)}{2m_t} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_l}$$

kx, Ky方向

$$\varepsilon'(\mathbf{k}) = \varepsilon_{CBM} + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_l} + \frac{\hbar^2(k_y^2 + k_z^2)}{2m_t}$$

ベッセルの微分方程式

軸方向の2つの状態(重い電子)に対する閉じ込めの影響

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_t} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) - \frac{\hbar^2}{2m_t} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \Phi(\mathbf{r}) = \varepsilon \Phi(\mathbf{r}) \quad \text{を円柱座標系 } (\rho, \phi, z) \text{ で解く}$$

$$\tilde{z} = \sqrt{\frac{m_t}{m_i}} z \quad \text{とおくと} \quad \longrightarrow \quad -\frac{\hbar^2}{2m_t} \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \Phi}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \tilde{z}^2} \right) = \varepsilon \Phi(\rho, \phi, \tilde{z})$$

$\Phi(\rho, \phi, \tilde{z}) = R(\rho)Q(\phi)Z(\tilde{z})$ とおくと、変数分離できて

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 Q}{\partial \phi^2} = -\nu^2 Q &\longrightarrow Q(\phi) = e^{i\nu\phi} \\ \frac{\partial^2 Z}{\partial \tilde{z}^2} = -k^2 Z &\longrightarrow Z(\tilde{z}) = e^{ik\tilde{z}} \end{aligned}$$

動径部分は
$$\frac{\partial^2 R}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial R}{\partial \rho} + \left(\frac{2m_t \varepsilon}{\hbar^2} - k^2 - \frac{\nu^2}{\rho^2} \right) R = 0$$

さらに
$$\begin{cases} \alpha^2 = \frac{2m_t \varepsilon}{\hbar^2} - k^2 \\ x = \alpha \rho \end{cases} \quad \text{とおいて} \quad \longrightarrow \quad \frac{\partial^2 R}{\partial x^2} + \frac{1}{x} \frac{\partial R}{\partial x} + \left(1 - \frac{\nu^2}{x^2} \right) R = 0$$

この解は ν 次のベッセル関数となる

$$\left\{ \begin{array}{l} \alpha^2 = \frac{2m_t \varepsilon}{\hbar^2} - k^2 \\ x = \alpha R \\ R = 4\text{nm} = 75.59\text{a.u. (ワイヤ半径)} \end{array} \right. \longrightarrow \text{よりエネルギーを見積もる}$$

0次, 1次のベッセル関数の零点 (最初の2つ)

$$J_0(x_n) = 0 \quad x_1 = 2.405 \quad x_2 = 5.520$$

$$J_1(x_n) = 0 \quad x_1 = 3.832 \quad x_2 = 7.016$$

0次の場合

$$\alpha_1 = \frac{x_1}{R} = 0.0318 \quad \alpha_2 = \frac{x_2}{R} = 0.0730 \quad (\text{半径4nmのところで波動関数が0になる条件})$$

エネルギー ($m_t=0.22$ を用いる)

サブバンド間エネルギー差

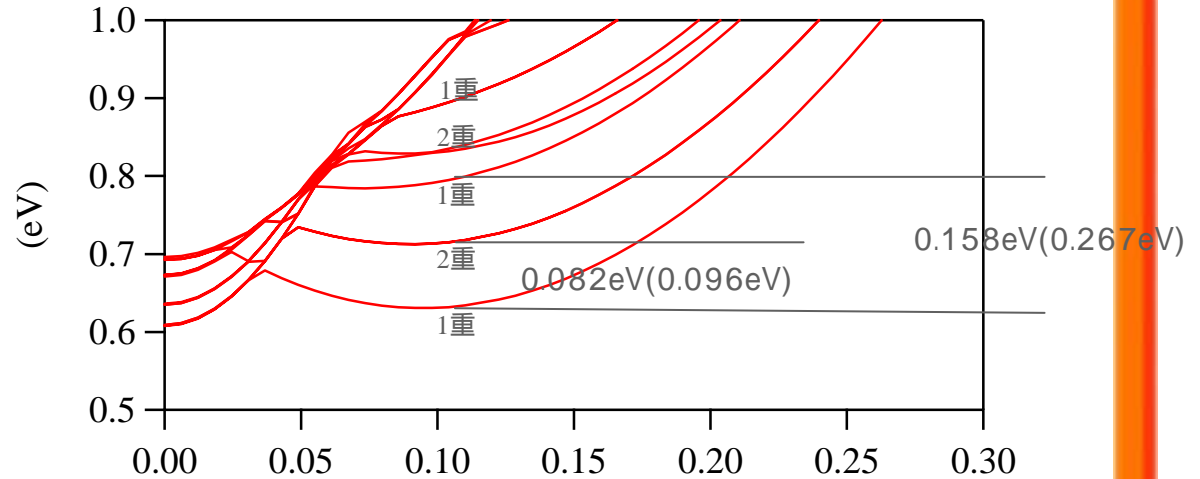
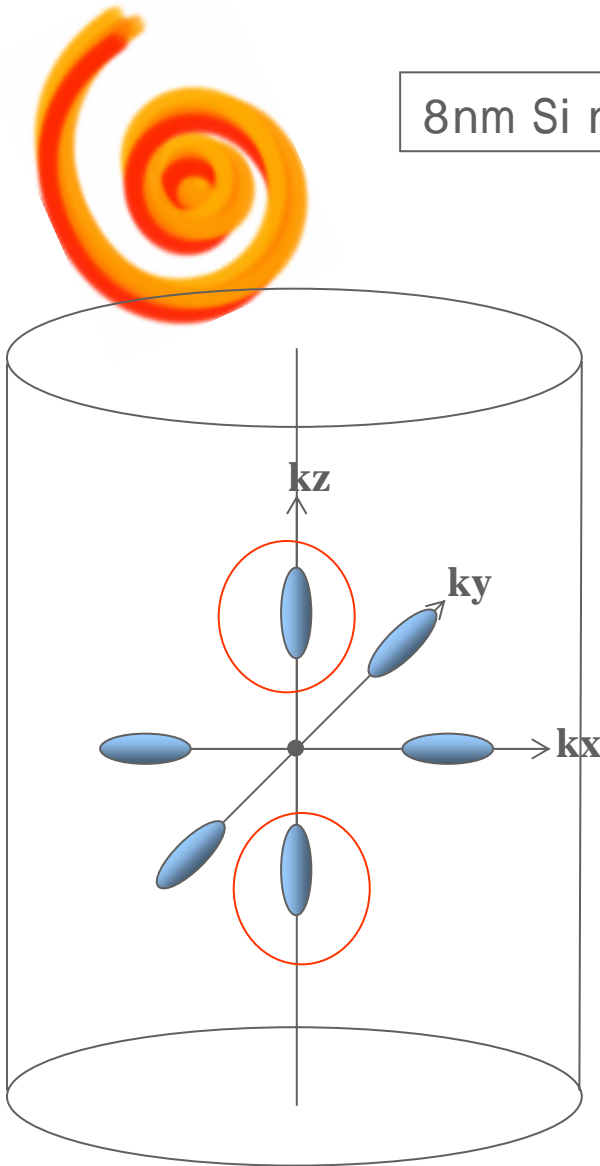
$$\varepsilon_1^{\nu=0} = \frac{\hbar^2 \alpha_1^2}{2m_t} = 0.0626(\text{eV}) \quad \varepsilon_1^{\nu=1} = \frac{\hbar^2 \alpha_1^2}{2m_t} = 0.159(\text{eV})$$

$$\varepsilon_2^{\nu=0} = \frac{\hbar^2 \alpha_2^2}{2m_t} = 0.330(\text{eV})$$

$$\varepsilon_2 - \varepsilon_1 = 0.27(\text{eV})$$

- Band gap energy :
 $E_g = 0.608\text{eV}$ (@ Γ)
 $E_g = 0.631\text{eV}$ (@CBM)

8nm Si nanowire : band and effective mass



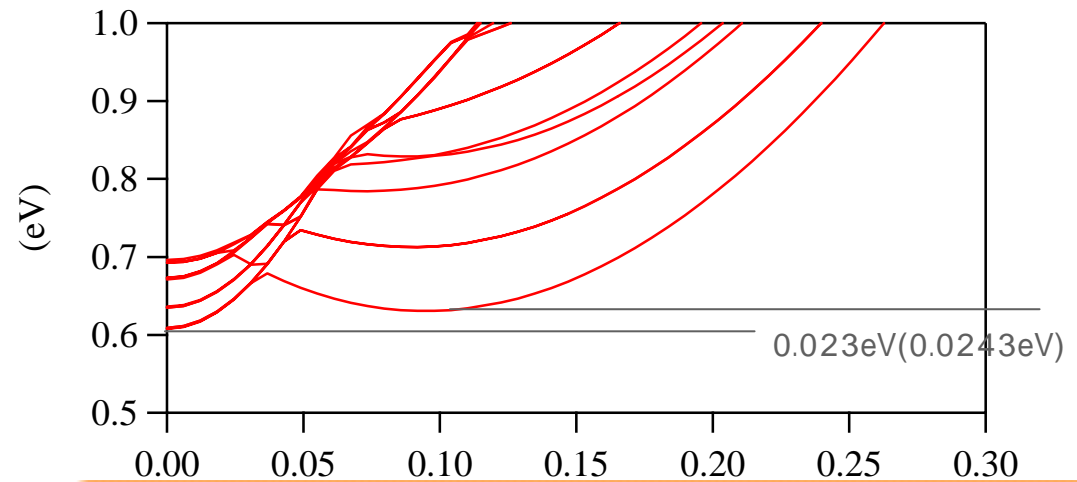
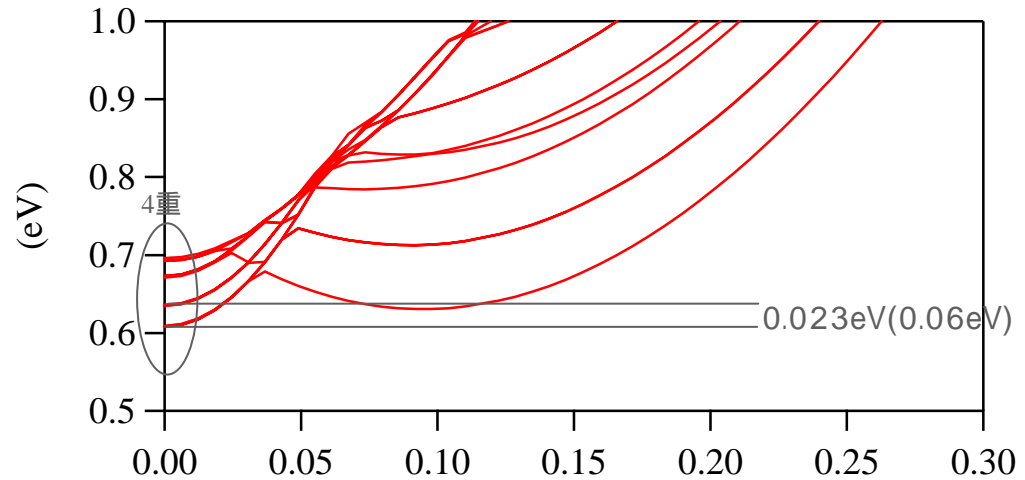
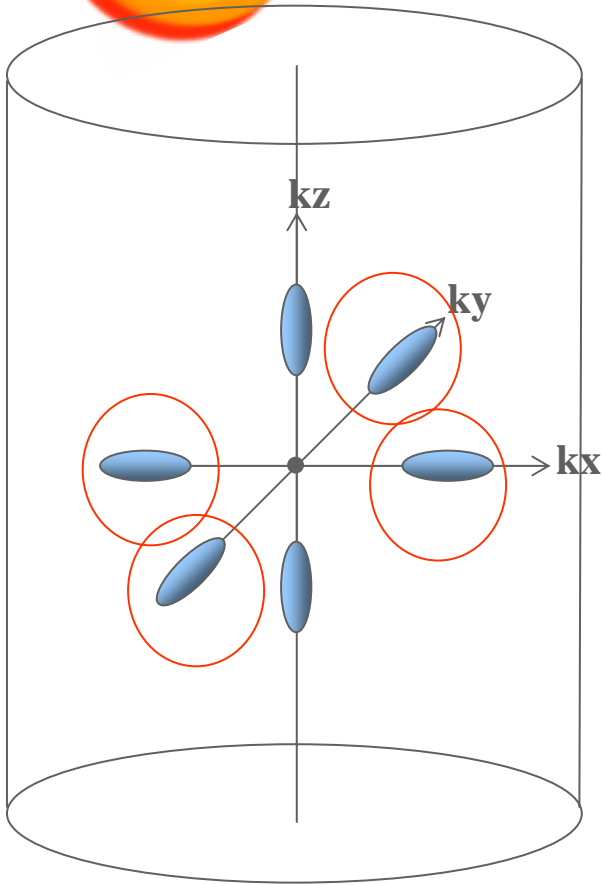
$$\frac{\partial^2 R}{\partial x^2} + \frac{1}{x} \frac{\partial R}{\partial x} + \left(1 - \frac{\nu^2}{x^2}\right) R = 0$$

$$\nu = 0 \quad (1\text{重})$$

$$\nu \neq 0 \quad \pm \nu \quad (2\text{重})$$

8nm Si nanowire : band and effective mass

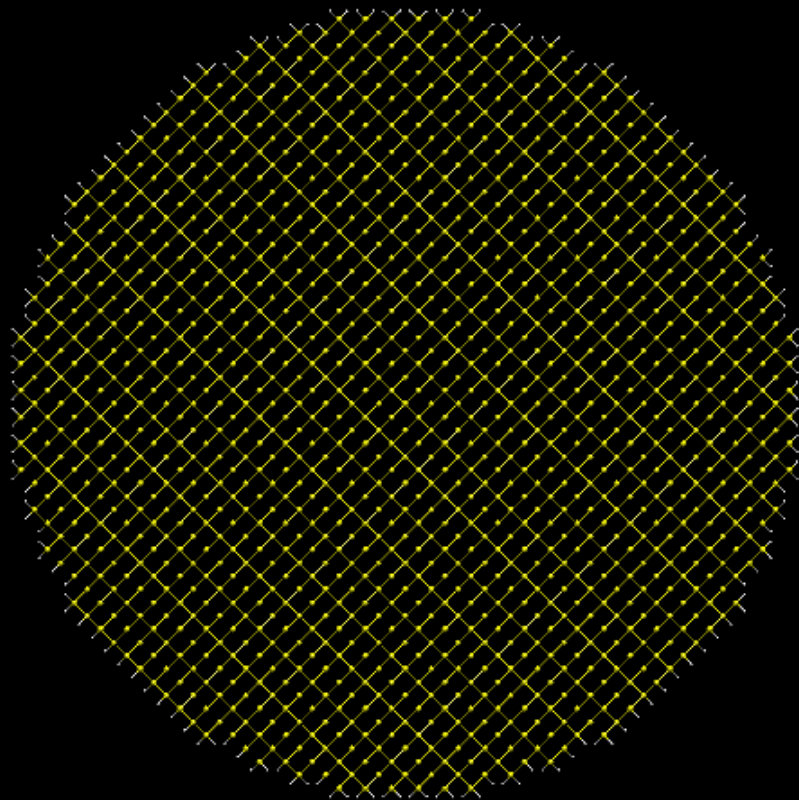
- Band gap energy :
Eg=0.608eV (@ Γ)
Eg=0.631eV(@CBM)



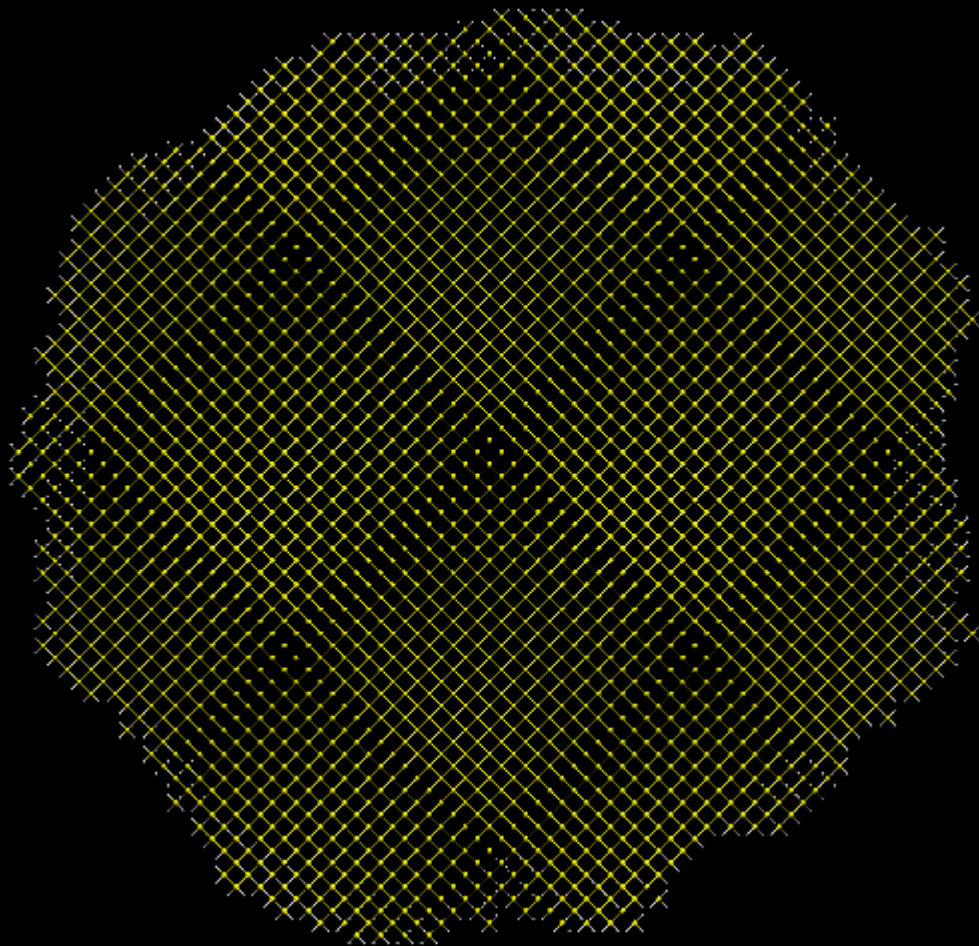
教訓：大規模で複雑な計算をしていたはずが、結果がかえって単純になる場合がある

表面ラフネスのあるシリコンナノワイヤのモデル (ワイヤ軸方向6周期分)

断面径8nm
長さ 0.5 nm (1525原子)



平均径10nm + 表面乱れ
長さ 3 nm (14,366原子)



PACS-CS1024 nodes (peak performance : 5.6 GFLOPS/node)

Subspace diagonalization : 4600 sec.

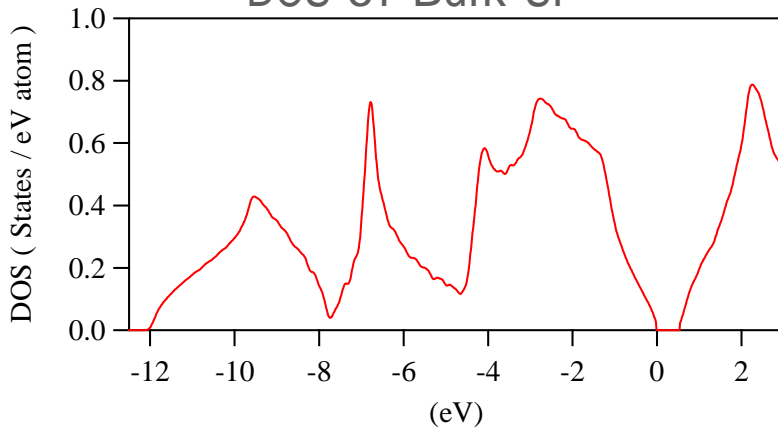
Gram-Schmidt : 2300 sec.

Conjugate-Gradient Method : 3700 sec.

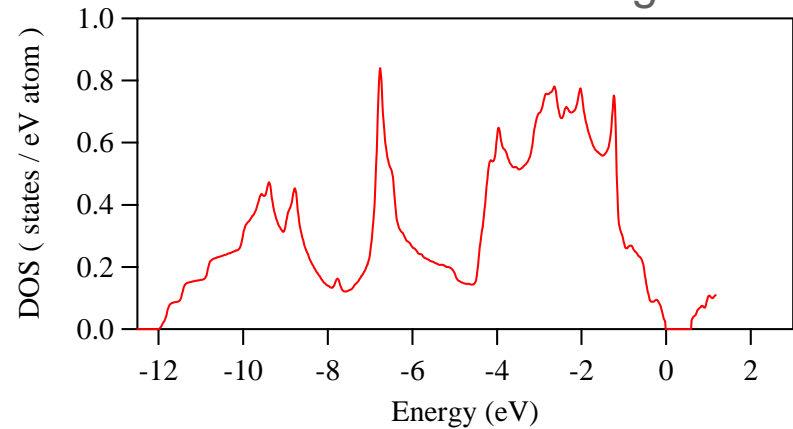
Total Energy calc. : 1200 sec.

Total(1 step) : 12,000 sec.

DOS of Bulk Si



DOS of SiNW with roughness



$d=10\text{nm}$ (with roughness)
Si₁₂₈₂₂H₁₅₄₄(14,366原子)
 $E_g=0.57\text{eV}$



Summary

- ・ 2030年以降のLSIはSiナノワイヤFETが担うと目されている
- ・ 単純な「微細化」という設計指針が通用しなくなっている 大規模電子状態計算による設計
- ・ 超並列計算機を駆使した実デバイスサイズでの第一原理計算 直径20nm、チャネル長10nmで200,000原子程度のシステムになる（次世代ペタコンで可能？）
- ・ 14,000原子程度の系の計算を約300時間で達成
- ・ 複雑で大規模な計算をしていたはずが結果がかえって単純になる場合（近似レベルの異なる手法への橋渡し）
- ・ Si/SiO₂界面（ラフネス）