

半導体デバイスにおけるキャリア輸送の 大規模分子動力学シミュレーション

早稲田大学 神岡武文 渡邊孝信(プロジェクトリーダー)

EMCMD

研究目的

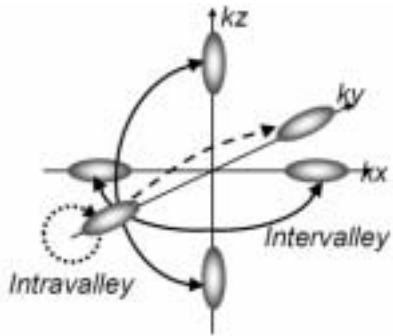
現在の半導体デバイス工学の中心課題の一つである「電気特性揺らぎ」の解明に資する大規模シミュレーション技術を開発する。

EMC-MD (Ensemble Monte Carlo – Molecular Dynamics) 法

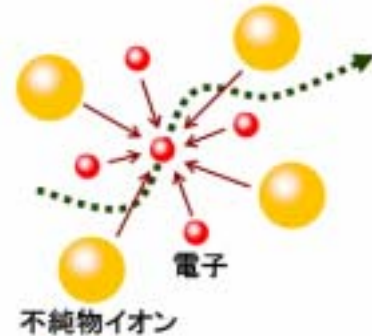
電子、不純物イオンを古典粒子として表現し、

各々のキャリアの軌跡を計算し、デバイス中の電流を再現する。

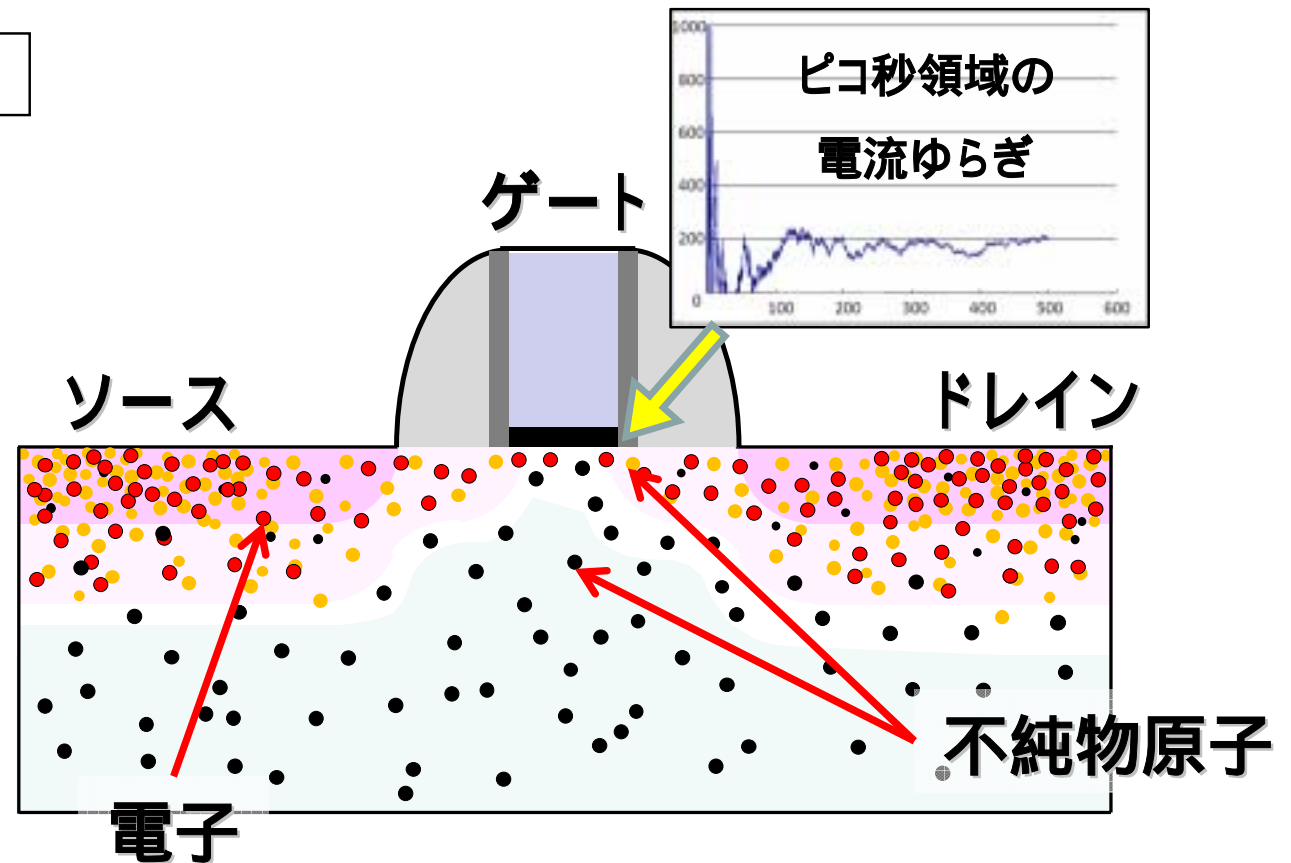
EMC法: フォノン散乱



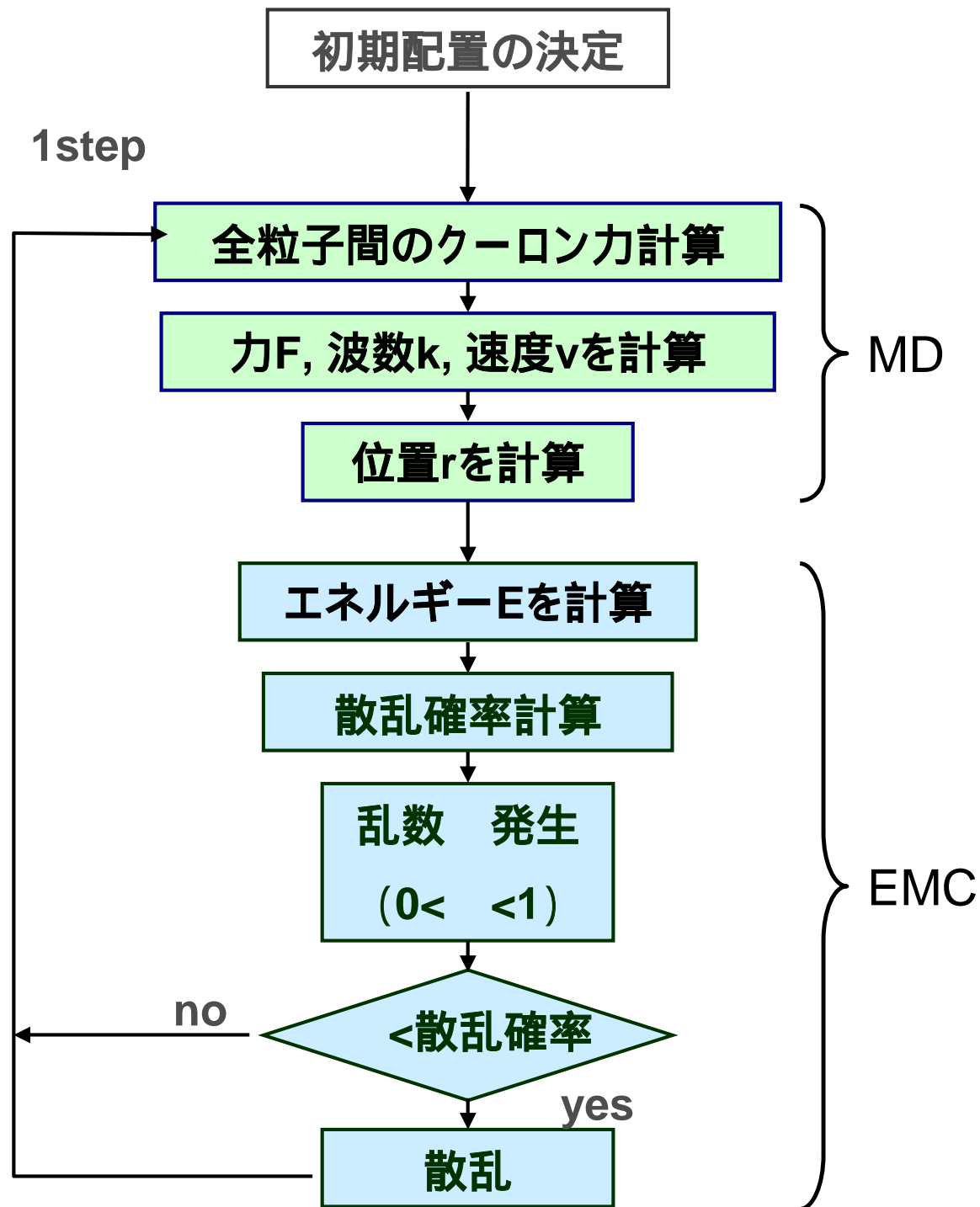
MD法: 不純物散乱



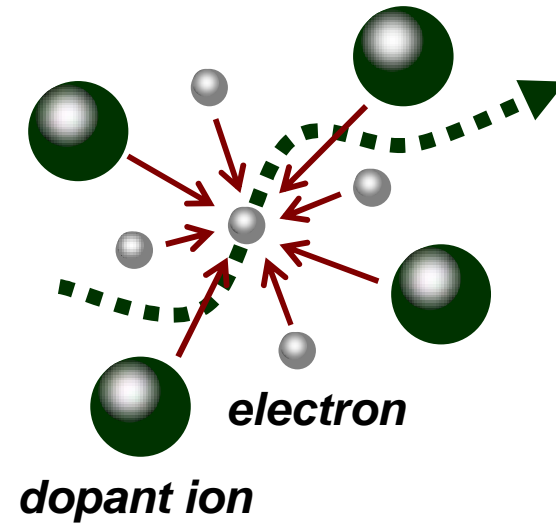
時間揺らぎを支配する因子を明らかにし、S/N比の優れた「静かな」デバイスへの設計指針を提案



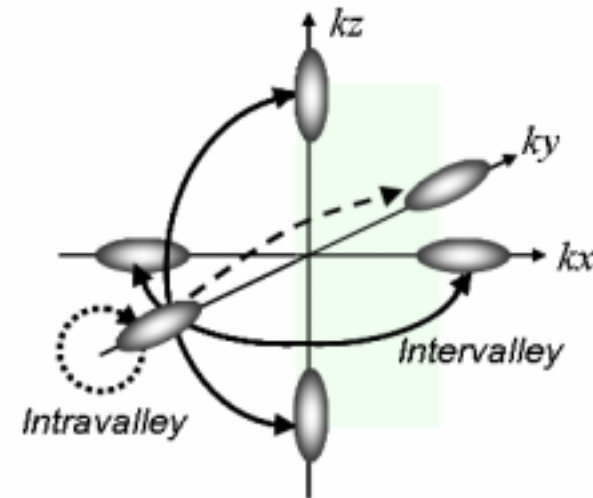
EMC-MD法



ドーパントイオン、電子を古典的粒子とみなす



MD法→力を計算、実空間での軌跡を求める
<<クーロン散乱>>



EMC法→運動量を確率的に変化させる
<<フォノン散乱>>

平成21年度後期- 学際共同利用での研究内容

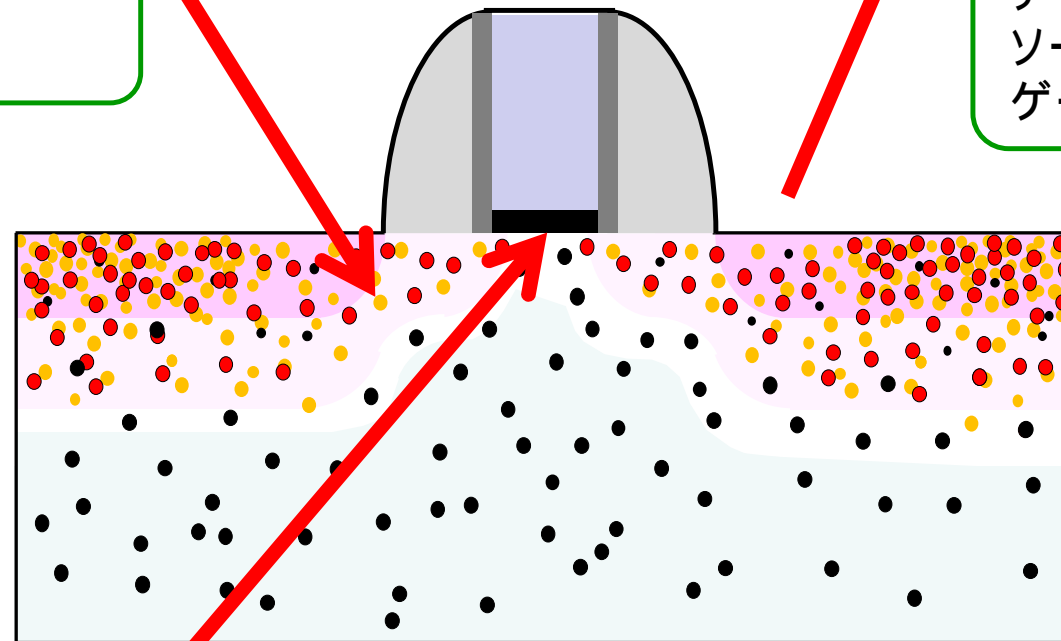
nチャネルMOSFETのシミュレーションのための要素技術開発

ドナーイオンのポテンシャル設計

電子-ドナーイオン相互作用の
ソフトニングパラメータ決定

デバイス構造のデザイン

チャンネル空乏領域
ソース・ドレイン領域
ゲート電極



● : Electron
● : Donor
● : Acceptor

界面の境界条件設定

完全弾性散乱
非弾性散乱

大規模・高速化

Phantom GRAPEの使用
プログラムの並列化

ドナーイオンのポテンシャル設計

点電荷間のCoulomb相互作用

$$V(r) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_{Si}} \left[-\frac{1}{r} \right]$$

ソフトニングポテンシャル(1)

$$V(r) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_{Si}} \left[-\frac{\tanh(Ar)}{r} \right]$$

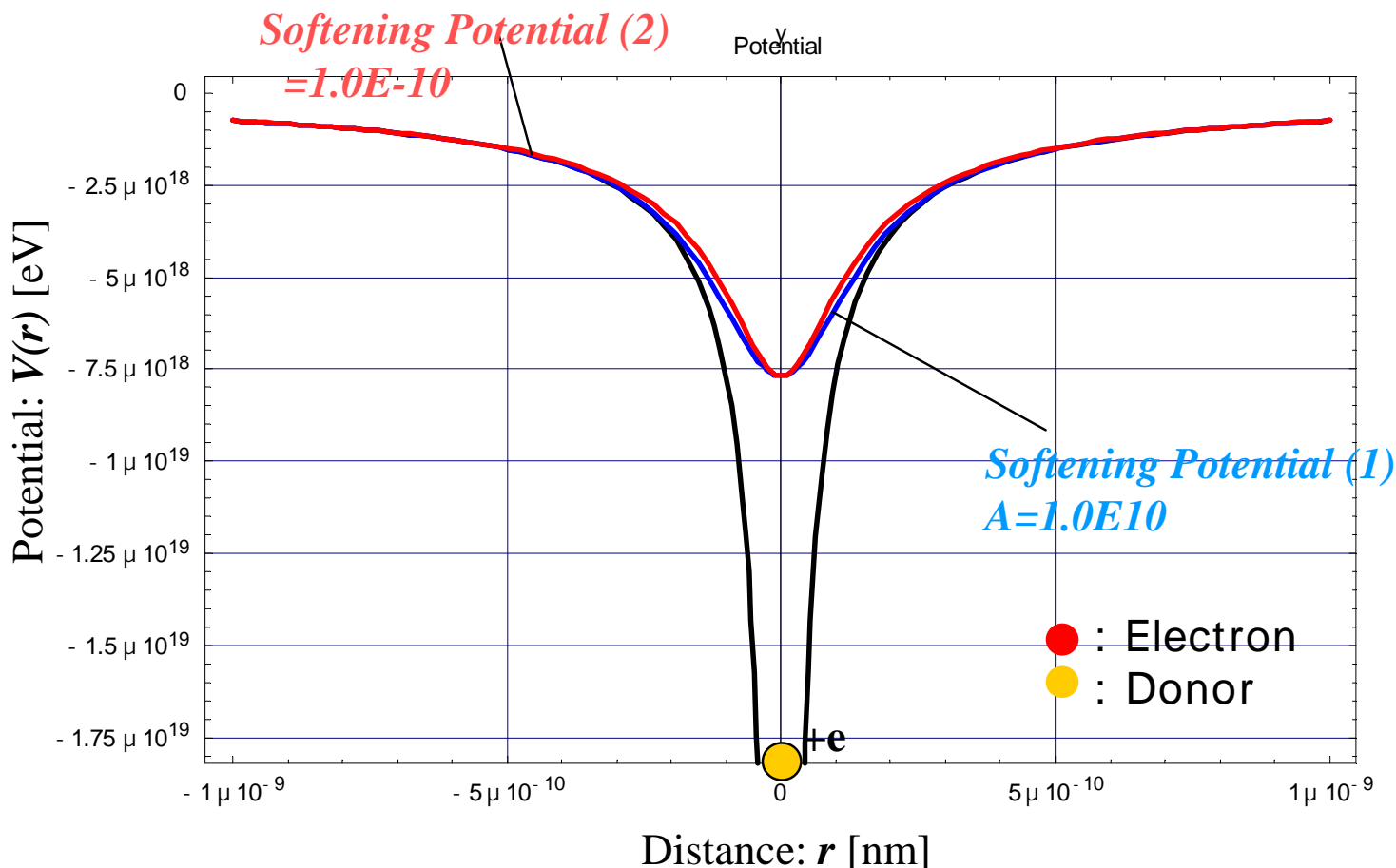
当グループが用いてきたポテンシャル

ソフトニングポテンシャル(2)

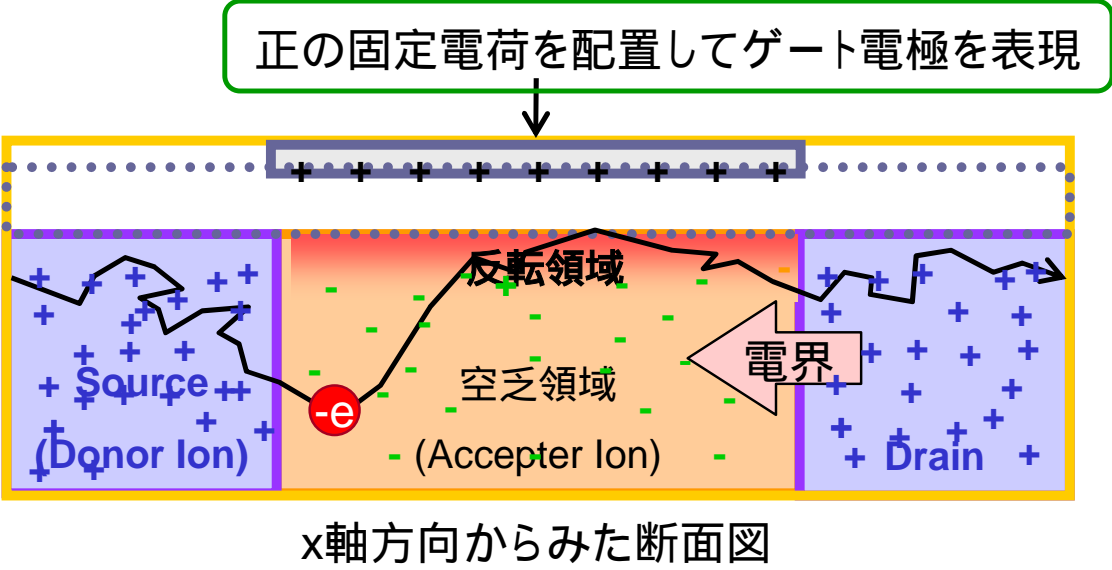
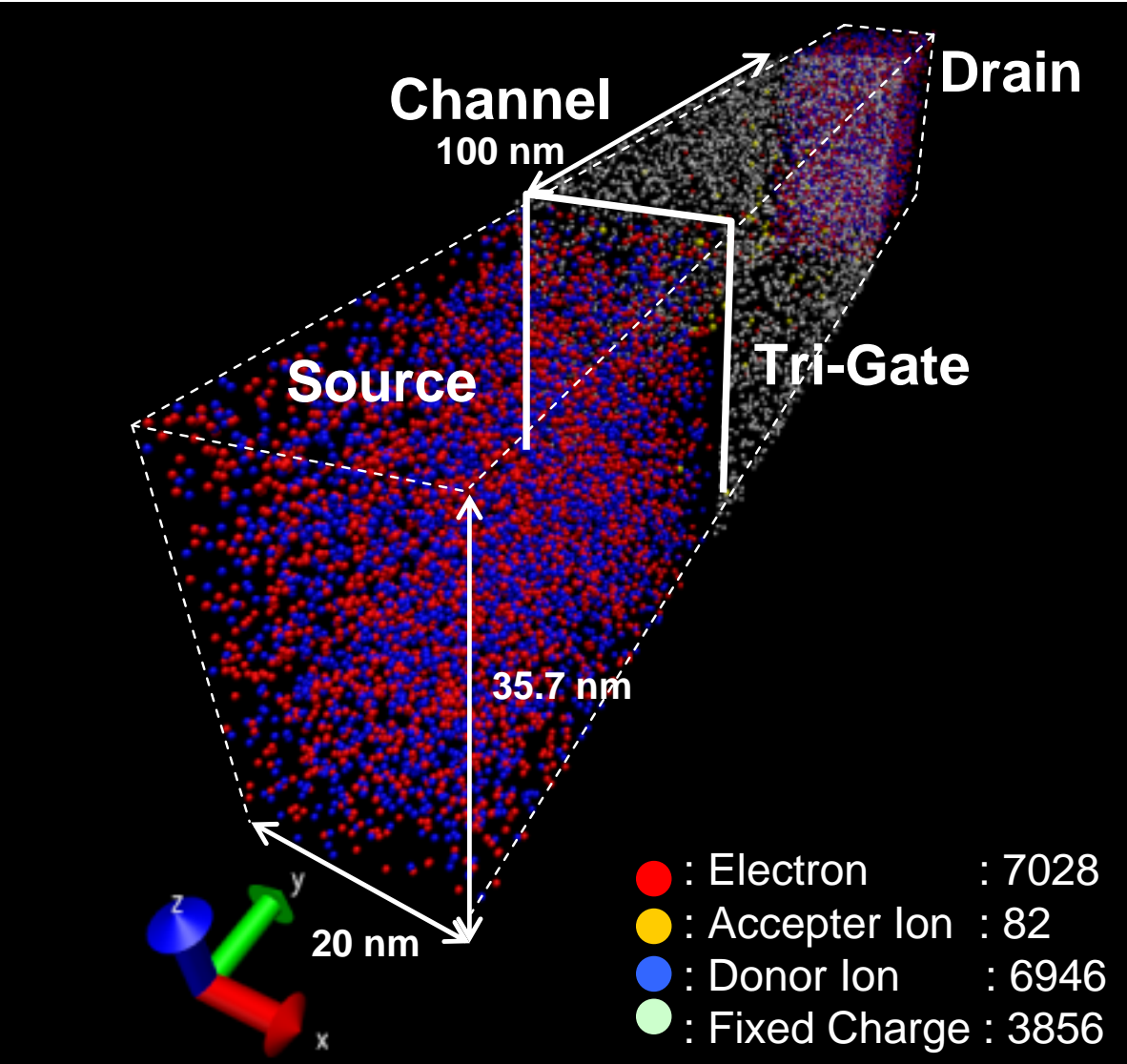
$$V(r) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_{Si}} \left[-\frac{1}{(|r|^2 + \epsilon^2)^{1/2}} \right]$$

GRAPE ライブラリで用いられるポテンシャル

Phantom GRAvity PipE



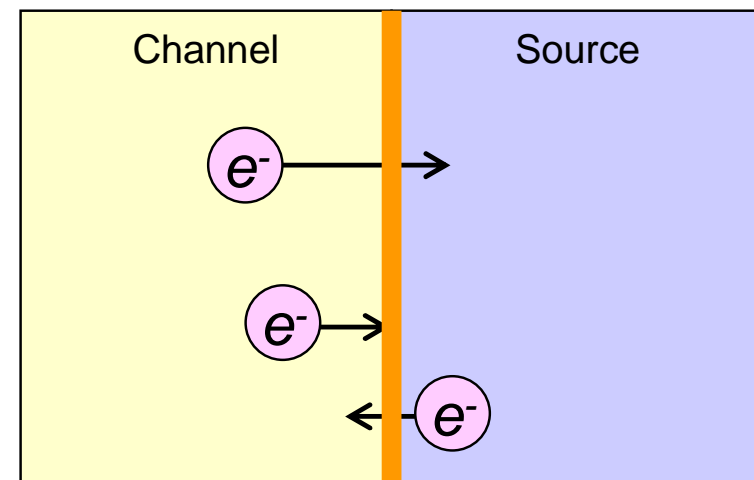
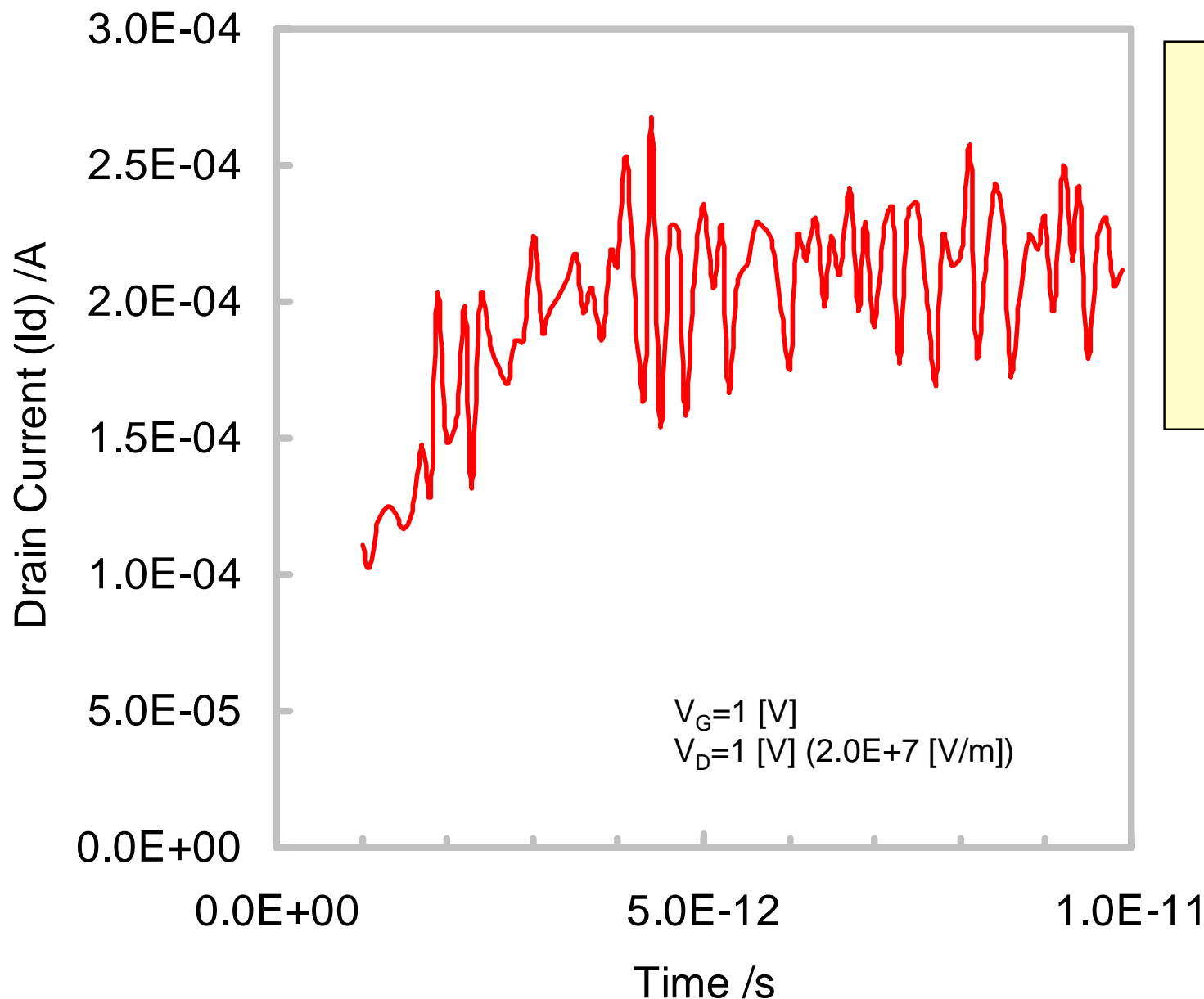
Modeling: Tri-Gate MOS-FET



様々なデバイス構造で、
電気特性をシミュレートする。

ソース/ドレイン領域、酸化膜/ゲート電極界面を含んだ「実デバイス寸法の系」のデバイスをモデリング

ドレイン電流の時間発展



$$I_d = \frac{\left(\sum_{\text{SamplingStep}} \Delta N_{ele}^{C \rightarrow D} \right) \times e}{\Delta t_{\text{sampling}}}$$

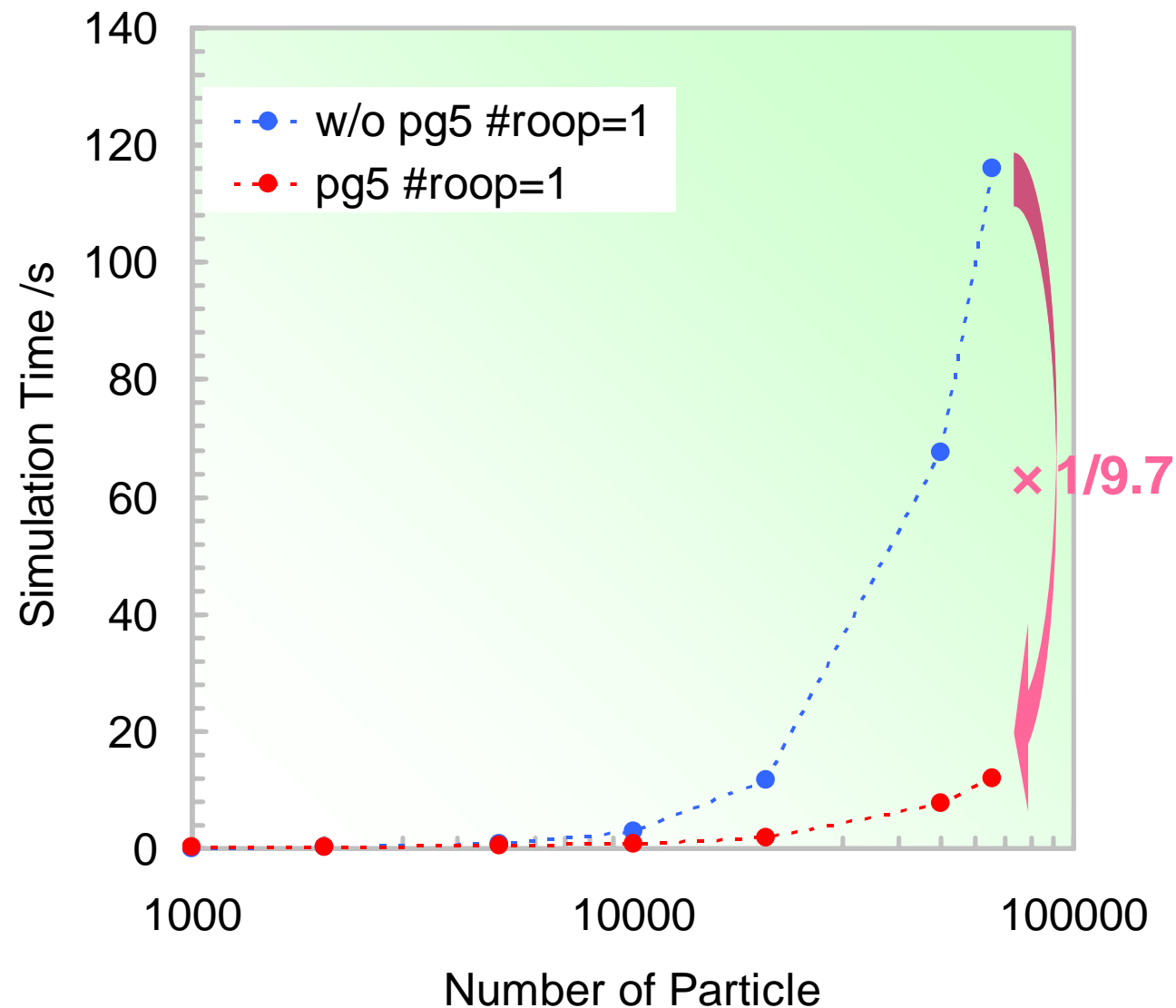
t_{sampling} : サンプルング時間[s]
 $N_{ele}^{C \rightarrow D}$: C/D界面を通過した電子数
 e : elemental charge [C]

MD Time Step: $1.0E-16$ [s]
1 [psec]経過後から I_d を計測 (Sampling Rate: $1E+13$ [Hz])

ピコ秒領域のドレイン電流揺らぎを計測→揺らぎの周波数、S/N比、を解析

Phantom GRAPEによるCoulomb相互作用計算の高速化

T2K-Tsukuba上でPhantom-GRAPeライブラリを利用



10000電子系で3.5倍、65535電子系で9.7倍、高速化することを確認

平成22年度の目標

- 平成21年度に準備した要素技術を動員し、微細MOSFETの系統的なデバイスシミュレーションを実施する。
 - ・ デバイスの微細化に伴って顕在化する定常的な特性揺らぎ
 - ・ ピコ秒オーダーの短い時間スケールにおける電流揺らぎの定量予測
- プログラムの並列化による計算の更なる高速化
 - ・ 相互作用を有限長でカットオフし、領域分割で並列化
 - ・ 高速多重極子展開による並列化