

実験 III テーマ P(c) ナノスケールデバイスデザイン(2015 年度)

1. 目的 ～ ナノスケール電子モデリング：固体中の電子の運動をコンピュータ上に再現する ～

- ナノスケールで起こる電子輸送現象(ドリフト運動、散乱等)を、プログラミングと 3 次元 CG アニメーションを通じて理論的・視覚的に学び、電子材料物性の基礎である**移動度**と**速度飽和現象**を理解する。そして発展課題では、不純物の影響や新材料および擬似 MOS トランジスタのシミュレーション等を通じて、電子デバイス設計のスキルを修得する。

本実験では、材料およびデバイス内の自然現象・工学現象に対する豊かな基礎概念が養われ、未だ人類が知らない現象の解明や創造システムの表現手段として、プログラミングと CG アニメーションを各自が自由に操れるようになることを目指している。

2. 概要

図 1 に示す大きさ L_x, L_y, L_z の箱(デバイス)の中に N 個の電子をランダムに配置し電界 \mathbf{E} を z 方向に印加する。このとき適当な初期条件と境界条件の下で、次の N 電子系に対するニュートンの運動方程式を解く。

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \mathbf{F}_i - e \mathbf{E} \quad (i=1, 2, \dots, N) \quad , \quad e > 0 \quad (1)$$

ここで \mathbf{F}_i は電子間のクーロン反発力を表し、次式で与えられる。

$$\mathbf{F}_i = \sum_{j=1(\neq i)}^N \mathbf{F}_{ij} = \sum_{j=1(\neq i)}^N \frac{e^2}{4\pi\epsilon_r\epsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^2} \frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \quad (2)$$

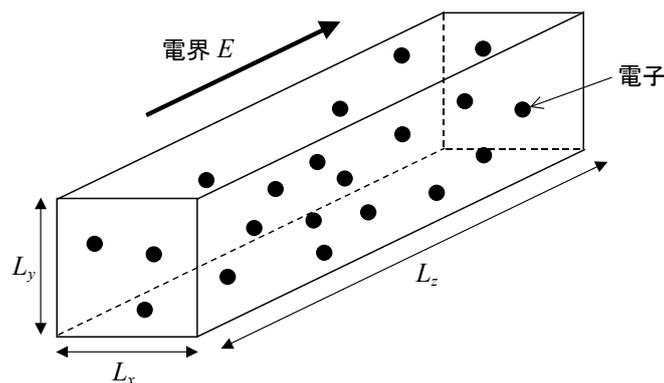


図 1. ナノスケール導体中の N 電子系シミュレーション。

実際の固体中では、外部から印加した電界や電子間のクーロン反発力の他に、格子振動による散乱(フォノン散乱)や不純物による散乱、さらにはナノスケール特有の異なる材料との接触界面での凹凸(ラフネス)散乱などが発生し、電子の運動に影響を与える。これらは、MOS トランジスタや半導体レーザなどのデバイス特性を左右する大変重要な物理現象であり、本実験でこれらの基礎を学びながら、電子・光デバイス研究への関心が高まることを期待している(関連授業: 数理物理工学、半導体電子工学)。

3. 初期条件の与え方

3.1 初期配置

L_x, L_y, L_z の箱の中にランダムに配置するには、乱数 r [0~1] を用いて各座標を次のように与える。

$$x = r \times L_x \quad (3)$$

$$y = r \times L_y \quad (4)$$

$$z = r \times L_z \quad (5)$$

3.2 初期速度

本実験では、すべての電子の初期速度はゼロを与えることにする。

$$v_x = 0 \quad (6)$$

$$v_y = 0 \quad (7)$$

$$v_z = 0 \quad (8)$$

4. 境界条件

[1] z 方向には周期的境界条件を与える(図 2(a))。

[2] x, y 方向には鏡面反射条件を与える(図 2(b))。

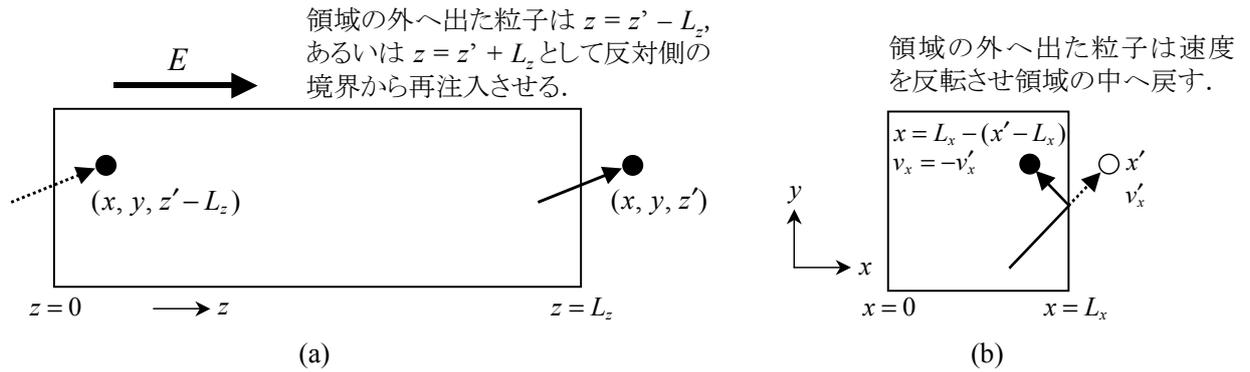


図 2. 境界条件. (a)周期的境界条件、(b)鏡面反射条件.

5. 計算の流れ(実際のプログラミングでは「6.1 音響フォノン散乱」で述べる簡単化を参考にせよ)

デバイス内の電子は、電界による加速と散乱を繰り返しながら電極間を走行する。この様子を模式的に描くと図 3 のようになる。散乱から散乱までの時間を自由走行時間 τ とよび、その間の電子は式(1)と(2)に従って自由走行する。この自由走行中の電子の状態変化は、式(1)の運動方程式より次のように計算される(付録 A)。

$$\mathbf{v}_i(t + \tau) = \mathbf{v}_i(t) + \frac{\mathbf{F}_i(t) - e\mathbf{E}(t)}{m} \tau \quad (9)$$

$$\mathbf{r}_i(t + \tau) = \mathbf{r}_i(t) + \mathbf{v}_i(t) \tau \quad (10)$$

自由走行後は、次節で述べる散乱を受け速度とエネルギーが変化する。

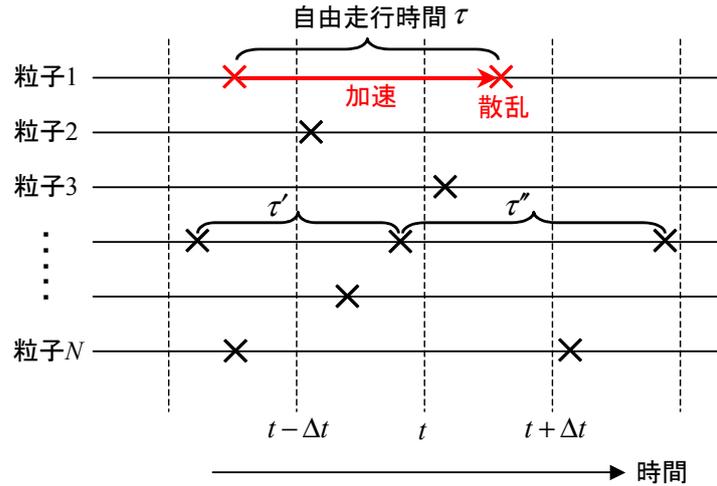


図 3. N 粒子系シミュレーションの流れ図. 水平の線はそれぞれが各粒子の時間軸を表す. 等間隔の垂直の破線は粒子の状態を観測する時間を表し、その間隔は時間ステップ Δt である。×印は散乱が起こる時刻を示す。

6. 散乱の取り入れ方(散乱については参考文献 [1] を参照のこと)

ナノスケールデバイスで重要となる散乱機構は次の 4 種類である。

- フォノン散乱 (= 音響フォノン散乱 + 光学フォノン散乱)、
- 不純物散乱、
- 電子電子散乱
- ラフネス(界面凹凸)散乱

このうち電子電子散乱は、式(2)の電子間クーロン反発力で自動的に取り入れられる。その他の 3 つの散乱機構については、以下で述べるような簡単な手法で取り入れることができる。

6.1 音響フォノン散乱

音響フォノン散乱の特徴は、散乱前後で電子のエネルギーが保存される**弾性散乱**であることと、散乱後の電子はあらゆる方向に等しい確率で散乱される**等方性散乱**であるということにある。これらの特徴を取り入れるために本実験では、次のようなアプローチを用いることにする。

音響フォノンによる単位時間当たりの散乱確率を図 4 に示すように、電子エネルギーによらず一定の値 W_0 (1/s) と近似する。このとき電子が散乱を受けずに自由に走れる時間(自由走行時間) τ は、次式を用いて計算することができる(付録 B)。

$$\tau = -\frac{\log r_1}{W_0} \quad (11)$$

ここで r_1 は乱数[0~1]である。注意: 散乱はランダムに起こ

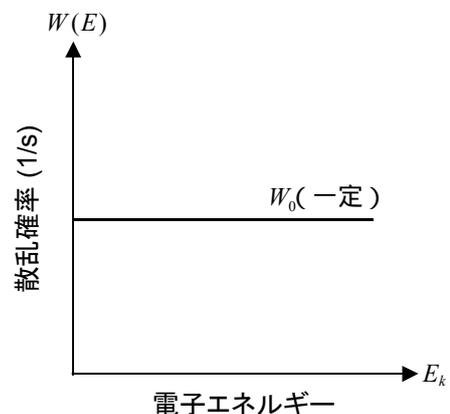


図 4. 音響フォノン散乱の散乱確率モデル.

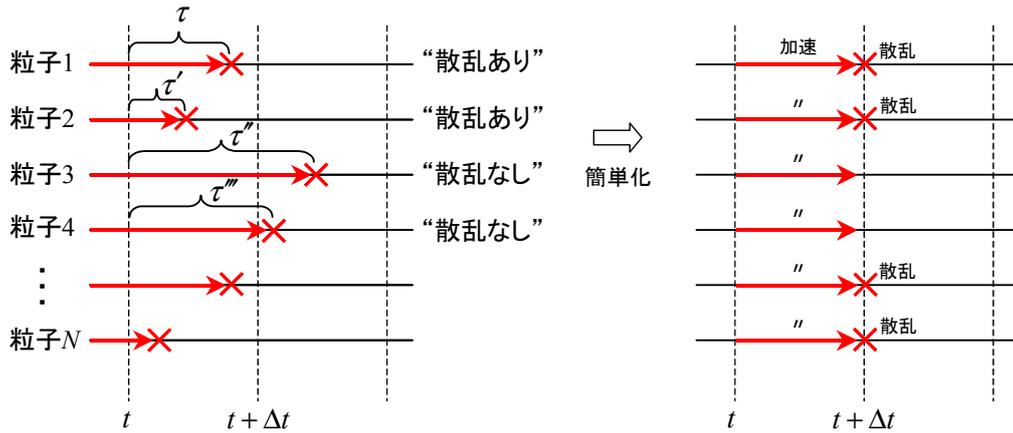


図 5. N 粒子系シミュレーションの簡単化.

るため、自由走行時間 τ は粒子毎および時間毎に計算し直して与える必要がある。 W_0 の値は代表的な半導体材料では、室温 ($T = 300\text{K}$) で $W_0 \approx 10^{12} (1/\text{s})$ である。

ここで計算の簡単化について説明する。実際の N 粒子系シミュレーションでは、時間に関して一定の時間ステップ Δt で計算を進めるが、図 3 に示すように散乱はランダムに発生するため、自由走行と散乱の時間を厳密に考慮するには工夫が必要となる[参考文献 2]。そこで本実験では、次のような近似を用いることにする。もちろん参考文献 1 を参考にして厳密な方法にトライしても構わない。

簡単化の方法として、自由走行時間が時間ステップ Δt よりも小さい粒子のみ散乱されると近似する。すなわち

$$\begin{aligned} \tau \leq \Delta t \quad \text{ならば} \quad & \text{散乱あり} \\ \tau > \Delta t \quad \text{ならば} \quad & \text{散乱なし} \end{aligned} \quad \ast$$

とする。図 5 の例では、粒子 1 と 2 は散乱され、粒子 3 と 4 は散乱されないということにする。このときの散乱が起こる時刻は図 5 の右の図に示すように統一する。まず全粒子が Δt 秒間自由走行(加速)し、“散乱あり”の粒子だけ $t + \Delta t$ 秒に散乱されるとする。このようにすることで計算のステップと散乱が起こる時刻を一致させることができ、プログラミングを簡単に行うことができる。計算ステップ数が十分に大きい場合には、本節の近似で十分と考えられる。

次に、散乱後の速度ベクトル $\mathbf{v}' = (v'_x, v'_y, v'_z)$ の求め方を述べる。散乱前の速度ベクトルを \mathbf{v} とすると、電界がかかっている場合の電子の運動エネルギーは

$$E_k = \frac{1}{2} m |\mathbf{v}|^2 = \frac{1}{2} m (v_x^2 + v_y^2 + v_z^2) \quad (12)$$

で計算される。音響フォノン散乱の場合、散乱前後で電子のエネルギーが保存されるので ($E_{k'} = E_k$)、散乱後の電子速度の大きさ v' は

$$v' = \sqrt{\frac{2E_{k'}}{m}} = \sqrt{\frac{2E_k}{m}} \quad (13)$$

となる。そして音響フォノン散乱が等方性散乱であることを考慮に入れると、散乱後の速度ベクトルの各方向成分は、式(13)の値と乱数 r_2 と r_3 (ともに $[0 \sim 1]$) を用いて

$$v_x = v' \sin \theta \cos \phi \quad (14)$$

$$v_y = v' \sin \theta \sin \phi \quad (15)$$

$$v_z = v' \cos \theta \quad (16)$$

$$\phi = 2\pi r_2 \quad (17)$$

$$\cos \theta = 1 - 2r_3 \quad (18)$$

で与えることができる。注意:乱数(r_1, r_2, r_3, \dots)は異なる乱数の値を与えること。式(18)より θ の値は $0 \sim \pi$ となるので、 $\sin \theta$ は正の値のみを取ることになる。実際の計算では $\sin \theta = \sqrt{1 - \cos^2 \theta}$ の関係を用いると良い。一方、 ϕ の値は式(17)より $0 \sim 2\pi$ となるので、 $\cos \phi$ と $\sin \phi$ は ϕ の値を用いて直接計算する。式(14)~(16)をプログラムに取り入れる際には、 θ と ϕ を間違えないよう注意すること。

6.2 光学フォノン散乱(放出過程)

光学フォノン散乱は、散乱前後で電子のエネルギーが大きく変化する非弾性散乱である。ただし、散乱後の電子があらゆる方向に等しい確率で散乱される等方性散乱であるという性質は、音響フォノン散乱と同じである。光学フォノン散乱には光学フォノンの放出と吸収の2つの過程が存在するが、通常、放出過程が支配的に起こるので本実験では放出過程のみを考慮する。音響フォノン散乱に光学フォノン散乱を加えた場合の単位時間当たりの全散乱確率は図6(a)のようになる。注意すべき点は、光学フォノンの放出過程が起こるためには、電子エネルギーが光学フォノンエネルギー E_{op} よりも大きくなる必要があるため、電子は $E_k \geq E_{op}$ の条件を満たす必要がある。このため全散乱確率は図6(a)のような階段状になり、光学フォノン散乱は特に高いエネルギーをもつ電子に対して大きな影響を与える。光学フォノンの散乱確率 W_1 は音響フォノンの散乱確率よりも大きく、通常 $W_1 \approx 10^{14} (1/s)$ である。 E_{op} の値は付録Cを参照のこと。

まず、音響フォノン散乱と光学フォノン散乱の2種類の散乱を考える場合、自由走行時間 τ を次式のように変更する。

$$\tau = -\frac{\log r_1}{W_0 + W_1} \quad (11')$$

ここで r_1 は乱数[0-1]である。このときも散乱が起こる条件※(P.4)はそのまま適用される。すなわち、一つの条件として条件※を与え散乱が起こることを決定した後に、以下に述べる音響フォノン散乱と光学フォノン散乱のどちらが選択されるかを定める過程に進む。まず、図6(a)の全散乱確率をその最大値

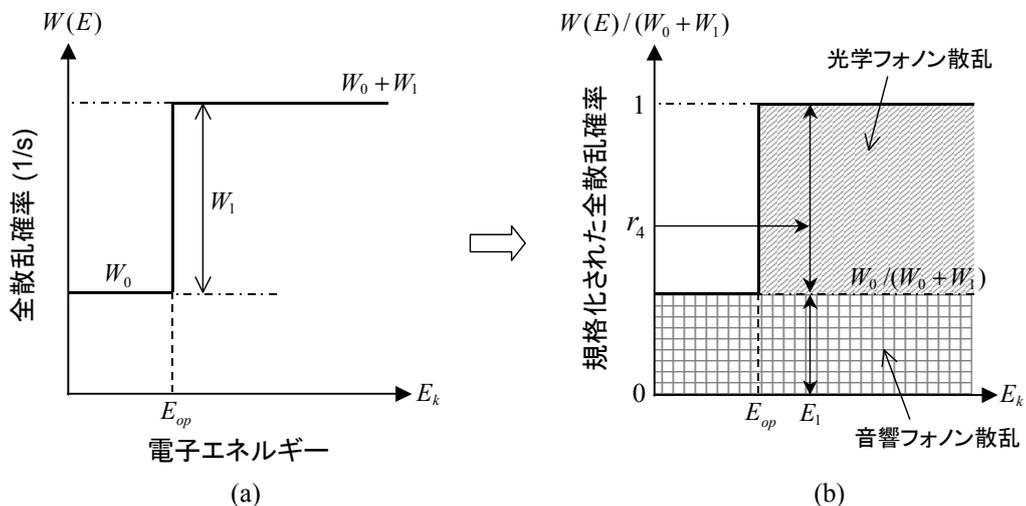


図6. 光学フォノンを加えた場合の散乱確率モデル。(a)全散乱確率、(b)規格化された全散乱確率。

$(W_0 + W_1)$ で規格化し、図6(b)のグラフをイメージする。図6(b)では最大値が1になるため、次のように[0~1]の乱数を用いて散乱の種類を選択することができるようになる。すなわち、たとえば図6(b)でエネルギー E_1 の電子を考えた場合、発生させた乱数 r_4 の値が

- I. $r_4 \geq W_0 / (W_0 + W_1)$ でかつ $E_1 \geq E_{op}$ ならば 光学フォノン散乱が選ばれる
- II. $r_4 < W_0 / (W_0 + W_1)$ ならば E_1 の値に関係なく 音響フォノン散乱が選ばれる

とすることで、フォノン散乱の種類を選択することができる。ちなみに、上記 I. で $E_1 < E_{op}$ の場合は散乱は起こらないので、運動エネルギーと速度ベクトルはそのままにして次の時間ステップに進めば良い。

光学フォノン散乱が選ばれた場合の散乱後の速度ベクトル $\mathbf{v}' = (v'_x, v'_y, v'_z)$ は次のように決められる。光学フォノン散乱が選ばれた場合は、散乱前後で電子のエネルギーが変化し

$$E_{k'} = E_k - E_{op} \quad (19)$$

となるので、散乱後の電子速度の大きさ v' は

$$v' = \sqrt{\frac{2E_{k'}}{m}} = \sqrt{\frac{2(E_k - E_{op})}{m}} \quad (20)$$

となる。このあとは音響フォノン散乱の場合と同様に、式(14)~(18)を用いて (v'_x, v'_y, v'_z) を計算すれば良い。一方、音響フォノン散乱が選ばれた場合は、6.1 節で述べた方法を適用する。

6.3 不純物散乱

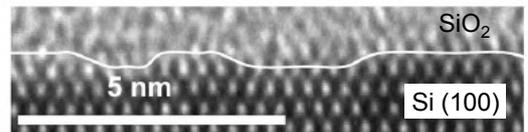
デバイス内にはアクセプターやドナーなどの不純物が存在する。不純物の位置を \mathbf{r}_j とし不純物の数が N_{imp} とすると、 i 番目の電子に働く不純物からの力は

$$\mathbf{F}_i^{imp} = \sum_{j=1}^{N_{imp}} \mathbf{F}_{ij} = \sum_{j=1}^{N_{imp}} \frac{Zq(-e)}{4\pi\epsilon_r\epsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^2} \frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \quad (22)$$

と表すことができる。ここで Z は不純物原子のイオン価数である(半導体の場合、通常 $Z = 1$ である)。 q はアクセプターの場合は $-e$ 、ドナーの場合は $+e$ となる(但し、本実験ではアクセプターのみを対象とすること。)不純物原子は運動しないと考えて、その位置は固定して計算する。また不純物の数は複数である必要はなく、1 個でも計算可能である。

6.4 ラフネス(界面凹凸)散乱

図7にMOSトランジスタのSi基板とSiO₂ゲート酸化膜の界面の写真を示す[参考文献3]。このように異なる材料が接している界面では原子レベルの凹凸が避けられず、電子はその凹凸による散乱を受ける。これをラフネス散乱とよび、本実験では次のようにして取り入れる。



- 原子層オーダーでの界面の凹凸が存在する
- キャリアの波長オーダーの界面凹凸により散乱が発生

図7. Si/SiO₂界面の凹凸.

図2(b)の鏡面反射条件では、界面(壁)に垂直な方向の速度を反転させて領域内に戻しているが、ラフネス散乱を取り入れる際には、全電子速度の大きさは保存したまま、ランダムな速度ベクトルを持つように領域内に戻してやればよい。これを拡散反射法とよび、取り入れ方としては式(14)~(18)の散乱後の速度ベクトルの決定法を応用するのが簡単である。また、鏡面反射と拡散反射の割合(0~100%)を変えることで、ラフネスの強さによる影響を調べることも可能である。

7. 平均速度と平均エネルギーの計算方法

全電子の平均速度 $\bar{\mathbf{v}}(t)$ と平均エネルギー $\bar{E}_k(t)$ は

$$\bar{\mathbf{v}}(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathbf{v}_i(t) \quad (23)$$

$$\bar{E}_k(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} m v_i^2(t) \quad (24)$$

で計算することができる。さらに時間平均した速度 $\langle \bar{\mathbf{v}}(t) \rangle$ とエネルギー $\langle \bar{E}_k(t) \rangle$ は

$$\langle \bar{\mathbf{v}}(t) \rangle = \frac{1}{T} \int_0^T \bar{\mathbf{v}}(t) dt = \frac{1}{T} \sum_{j=1}^{total_step} \bar{\mathbf{v}}(t_j) dt \quad (25)$$

$$\langle \bar{E}_k(t) \rangle = \frac{1}{T} \int_0^T \bar{E}_k(t) dt = \frac{1}{T} \sum_{j=1}^{total_step} \bar{E}_k(t_j) dt \quad (26)$$

を計算すれば良い。記号 $\langle \dots \rangle$ は時間平均を表す。

8. 電子密度と電流密度の計算方法

電子数が N で導体の体積が V のとき、電子密度 n は

$$n = \frac{N}{V} \quad (27)$$

となる。一方、 z 方向の電流密度 $j_z(t)$ は

$$j_z(t) = qn \bar{v}_z(t) \quad (28)$$

で計算することができる。

9. 電流密度の計算方法(II)

単位時間あたりに z 軸方向の壁を通過した電荷をカウントし、それを断面積で割ったものが電流密度に対応する。このようにして得られた電流密度と上記の式(28)で得られた電流密度は一致するはずである。

10. 実験課題(共通課題)

- 渡したプログラムには、各種パラメータの値、初期条件、境界条件、計算条件などが記述されていない。以下の指示及び本テキスト 9 節までの解説にしたがって、プログラムを拡張していきなさい。
- プログラムを変更した場合、プログラム名“program01.c”やデータ出力ファイル“output.dat”のファイル名を内容が分かるように変更し保存しておくこと。

[1] まず、z 方向の電界のみが印加された場合にプログラムが動くように修正していく

- 9～11 行目：基本物理定数の値(付録 D)をプログラムに書き入れなさい。
- 51～53 行目：導体のサイズを設定しなさい。必ず nm 単位で書き入れる。とりあえず $side_x = 20.0$, $side_y = 20.0$, $side_z = 100.0$ とする。
- 61 行目：粒子数 $PARTICLE_NUM$ を設定しなさい。ここでは 100 とすること。
- 64 行目：計算の時間間隔 dt を設定しなさい。ここでは 5×10^{-16} s とすること。
- 70 行目：計算回数 $total_step$ を設定しなさい。ここでは 10000 とすること。
- 73 行目：電界の値 $Efield$ を設定しなさい。 $-1 \times 10^5 \sim -1 \times 10^7$ V/m の範囲で任意の値を選ぶこと。
- 77 行目：データ出力用のファイル名を $output.dat$ とすることを確認しなさい。
- 82 行目：粒子の有効質量を Si の値(付録 C)に設定しなさい。自由電子の質量 m_0 は変数名 $emass$ を用いると良い。
- 86 行目：誘電率を Si の値(付録 C)に設定しなさい。真空誘電率 ϵ_0 は変数名 $ep0$ を用いると良い。
- 99～101 行目：式(6)～(8)に従って初期速度 ($v_x = v_y = v_z = 0$) を与えなさい。【参考】粒子の初期配置座標 x, y, z は 91～93 行目で、式(3)～(5)に従って与えている。ここで $((double)rand()/RAND_MAX-.0)$ は乱数発生関数を表す。

次に、粒子の位置(cd)と速度(vl)を動かす。

- 129～131 行目：式(2)に従ってクーロン反発力を計算する式を書き入れなさい。時間がかかりそうな場合は、とりあえずゼロのままでも構わないが、後で必ず完成させること。
- 139～141 行目：式(10)に従って dt 秒後 ($\tau = dt$) の位置を計算する式を書き入れなさい。
- 147～149 行目：式(9)に従って dt 秒後 ($\tau = dt$) の速度を計算する式を書き入れなさい。電界は z 方向のみに加えられていることに注意すること。
- 154～159 行目： $sumvz$ が 100 個の粒子の平均速度を計算していることを確認しなさい。

上記まで出来た段階で、プログラムをコンパイル・実行し(別紙 1 参照)、粒子が電界及びクーロン反発力によって運動する様子を確認しなさい。

上記のプログラムでは境界条件を与えていないため、粒子は導体からはみ出し、すぐに画面から消えてしまう。そこで次に、境界条件を組み込んでプログラムを完成させる。

- 170 行目：コメントアウト開始記号 $/*$ を取り除く。

- 200 行目: コメントアウト終了記号 */ を取り除く。
- 174, 178 行目: z 方向の境界に周期的境界条件 (図 2(a)) を書き入れなさい。
- 182, 183, 187, 188, 192, 193, 197, 198 行目: x, y 方向の境界に鏡面反射条件 (図 2(b)) を書き入れなさい。

上記の境界条件が組み込まれた段階で、プログラムを再度コンパイル・実行し(別紙 1 参照)、すべての粒子が導体内に閉じ込められたまま運動する様子を確認しなさい。それが確認できたならば、プログラムの修正は成功している(クーロン反発力が入っているか確認せよ)。

- 別紙 2 を参照し、ファイル output.dat に保存された全粒子の平均速度のグラフ ($\bar{v}_z(t) - t$ 曲線) を描きなさい。

[2] 次に、本テキスト 6 節の解説にしたがって、音響フォノン散乱と光学フォノン散乱を取り入れる。これ以降、電子間のクーロン反発力は無視して(全ての方向でゼロにして)計算すること。また、光学フォノン散乱の影響を確認しやすいように、電界の値を大きくしておく($\approx -10^6$ V/m)。

- 音響フォノン散乱を取り入れ、 $\bar{v}_z(t) - t$ 曲線を計算する。また、音響フォノン散乱を無視し電界のみを与えた場合の計算も行い、それと比較して、音響フォノン散乱による減速の効果と平均速度に振動が現れることが確認できれば計算成功。
- 次に光学フォノン散乱を取り入れ、 $\bar{v}_z(t) - t$ 曲線を計算する。光学フォノン散乱により、さらなる減速の効果と振動の抑制が確認できれば計算成功。
- それぞれのフォノン散乱が発生する回数をカウントし画面表示 (printf) させる、あるいはファイル保存 (fprintf) させるようにする。散乱の回数をチェックすることで、プログラムが正常に動いているかどうかの確認にもなる。
- 時間平均した z 方向速度 $\langle \bar{v}_z(t) \rangle$ を計算する。 時間平均の取り方は、7. を参考にする。電界 E を $-10^5 \sim -10^7$ V/m の間で変化させ $\langle \bar{v}_z(t) \rangle - E$ 特性を求める。高電界時に速度飽和が観測されれば計算成功(付録 E 参照)。電界の与え方についても付録 E を参考にせよ。
- 得られた $\langle \bar{v}_z(t) \rangle - E$ 特性の原点付近の傾きから、電子移動度 μ を計算する。
- 電子移動度が付録 C の実験値に近づくように音響フォノン散乱の確率 W_0 を調整する。そして電子移動度が実験値に最も近いと思われる $\langle \bar{v}_z(t) \rangle - E$ 特性と、各散乱回数(音響フォノンと光学フォノンを分けて)の電界依存性を求める。各散乱回数の電界依存性は考察で必要となるので忘れないこと。

→ 【P. 10】 11. グラフ作成 [1][2] + 12. 考察事項 [1]

- 光学フォノンエネルギー E_{op} の値を変化させて ($E_{op} = 0.02 \sim 0.2$ eV)、 $\langle \bar{v}_z(t) \rangle - E$ 特性の変化を計算する。光学フォノン散乱が高電界で与える影響に注目すること。

→ 【P. 10】 11. グラフ作成 [3] + 12. 考察事項 [2]

中間レポートは以下の 11.と 12.をまとめて提出すること。

11. グラフ作成

■ グラフの縦軸・横軸の変数名および単位を忘れないこと。また、用いたパラメータの値 (E_z 、 W_0 、 W_1 、 E_{op} 等)を明示すること。

- [1] 時間平均した z 方向速度の電界依存性 ($\langle \bar{v}_z(t) \rangle - E$ 特性)をグラフにせよ。電子移動度がシリコンの実験値に最も近い特性を載せること。必ず電子移動度の値を明示すること。
- [2] 音響フォノンと光学フォノンによる散乱回数の電界依存性をグラフにせよ(一つのグラフにまとめること)。
- [3] 光学フォノンエネルギー E_{op} を変化させたときの $\langle \bar{v}_z(t) \rangle - E$ 特性をグラフにせよ(一つのグラフにまとめること)。

12. 考察事項

[1] 11. **グラフ作成** [1] [2]の結果を用いて、以下のことを説明せよ(参考文献[1]参照)。

1. 高電界時に速度が飽和する理由(特に、光学フォノン散乱の回数と速度飽和の関係について触れること)
2. 音響フォノン散乱と移動度の関係

[2] 光学フォノンエネルギー E_{op} と飽和速度 v_{sat} の関係を表す近似式を導出せよ(参考文献[1]参照)。その式を用いて各 E_{op} に対する v_{sat} の近似値を計算し、11. **グラフ作成** [3]の結果と比較せよ。そして、飽和速度と光学フォノンの関係について考察を加えよ。

13. 自由課題(以下から選択する(自分で課題を考えても良い)。内容については別途相談可)

A. 物性評価(基礎編)

1. Si 以外の材料(Ge, GaAs 等)で試してみる。付録 C の値を用いて計算し、移動度等の特性を Si と比較してみよ。 W_0 と W_1 は Si と同じ値でよい。
2. 不純物(アクセプター)散乱を取り入れて、 $\langle \bar{v}_z(t) \rangle -E$ 特性への不純物の影響を調べる。不純物の位置は固定とし、不純物と電子の間に働くクーロン力を式(22)で取り入れると良い(6.3 参照)。不純物散乱は低電界と高電界のどちらで強く影響を与えるか注目すること。

例: 不純物の数(・位置)の影響、不純物の規則配置・不規則配置の影響など

3. ラフネス散乱を取り入れて、 $\langle \bar{v}_z(t) \rangle -E$ 特性への影響を調べる(6.4 参照)。ラフネス散乱についても低電界と高電界のどちらで強く影響を与えるか注目すること。

例: 導体の断面サイズを変化させた時の $\langle \bar{v}_z(t) \rangle -E$ 特性の変化

鏡面反射と拡散反射の割合を変化させた時の $\langle \bar{v}_z(t) \rangle -E$ 特性の変化、など

4. 平均自由行程(散乱と散乱の間の平均距離)の電界依存性(及び平均運動エネルギー依存性)を求める。シリコンの平均自由行程は、室温では、数 nm~数 10nm(電子エネルギーに依存する)と言われている。平均自由行程の計算は、定義通り、実際に散乱が起こった位置間の平均距離の合計を全散乱回数で割ることを出すが良い。計算には音響フォノン散乱と光学フォノン散乱を考慮すること。

B. 物性評価(応用編)

1. GaAs に高電界をかけるとガン効果(Gunn 効果)とよばれる負性抵抗が現れる。これは GaAs のバンド構造には、A.1 で考慮した有効質量の軽いバレー(状態)の上側に、有効質量が重いバレーが存在するために、高電界をかけると後者のバレーに電子が遷移し(バレー間遷移)発生する。GaAs のバンド構造を修正してガン効果を再現してみよ。有効質量が軽いバレーを Γ バレー、重いバレーを L バレーとよぶ。L バレーの有効質量は $0.55 m_0$ 、L バレーと Γ バレー間のエネルギー差は 0.31 eV とせよ。
2. 新しいエレクトロニクス材料として注目されているグラフェン(炭素一原子層膜)の速度-電界特性を求めてみよ。グラフェンは円錐状の分散関係 $E = \hbar v_f |\mathbf{k}| = \hbar v_f \sqrt{k_x^2 + k_z^2}$ を持ち、Si の数百倍以上の電子移動度を示すと言われている。ここで $\mathbf{k} = (k_x, k_z)$ は電子の波数ベクトルであり、2 次元平面構造を持つグラフェンでは、その平面に垂直な波数成分 k_y は存在しない。 v_f はフェルミ速度($\approx 10^6 \text{ m/s}$)を表し、Si の飽和速度の約 10 倍という大きな値を示す。

グラフェン中の電子の運動方程式は次のようになる(電界は z 方向に与えるとする)。

$$\frac{dz}{dt} = v_z = \frac{k_z}{\sqrt{k_x^2 + k_z^2}} v_f \quad (x \text{ 方向も同様}), \quad \frac{dk_z}{dt} = \frac{-eE_z}{\hbar} \quad \& \quad \frac{dk_x}{dt} = 0$$

グラフェンでは有効質量は存在しないため、式(A.3)の速度の式を上式の右側の式のように波数 k の式に変更して計算を行う。散乱後の波数ベクトルの各方向成分は式(14)~(16)ではなく、 $k_x = k' \sin \phi$, $k_z = k' \cos \phi$ となり、角度は等方性散乱を仮定し $\phi = 2\pi r$ (r は乱数)と与える。

C. OpenGL の工夫

OpenGL のプログラムに手を加えて、グラフィックス表示を工夫してみる。たとえば：

- 散乱が発生した瞬間にその粒子の色と大きさを変える。散乱の種類毎に表示方法を変えることも可能。
- 低エネルギー電子と高エネルギー電子を色分けして表示する。
- 不純物の位置を表示する。
-
-

D. デバイス応用 1

MOS トランジスタの性能を決める電子移動度の横方向電界 E_y 依存性 (⇒ ゲート電圧依存性) を計算してみよ (図 8 参照)。電子移動度の計算を行うため、 z 方向の電界は十分に小さな値 ($E_z \approx 10^6 \text{ V/m}$) で固定し、横方向の電界 E_y を $10^6 \sim 10^8 \text{ V/m}$ の間で変化させる。計算には、フォノン散乱とラフネス散乱 (Si/SiO₂ 界面のみ) を考慮すること。Si/SiO₂ 界面での鏡面反射と拡散反射の割合は 0.2~0.5 程度と言われている。求めた電子移動度-横方向電界依存性は、ゲート酸化膜の厚さによらず、また作製プロセスなどにも依存しないことから**移動度ユニバーサル曲線**と呼ばれている (参考文献[1] 10 章付録 A 参照)。

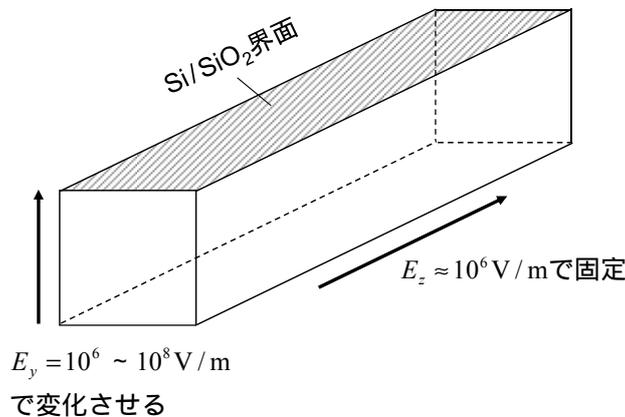


図 8. MOS トランジスタの電子移動度の横方向電界 E_y 依存性を計算する方法。

- Si/SiO₂ 界面での鏡面反射と拡散反射の割合を 0.2~0.5 の間で変化させてその影響を調べてみよ。
- 横方向の電界 E_y を大きくすると何故ラフネス散乱の影響が強くなるのか考えてみよ。

E. デバイス応用 2

MOS トランジスタに適用し、その動作原理を理解する。MOS トランジスタの構造は図 9(a) に示すようにソース、ドレイン、ゲートの 3 つの電極で構成される。その基本動作原理は、ゲートに与える電圧によって、ソースからドレインに流れる電流を制御するというものである (図 9(b))。この動作原理を、図 10 に示す擬似 MOS トランジスタモデルを用いて再現してみる。

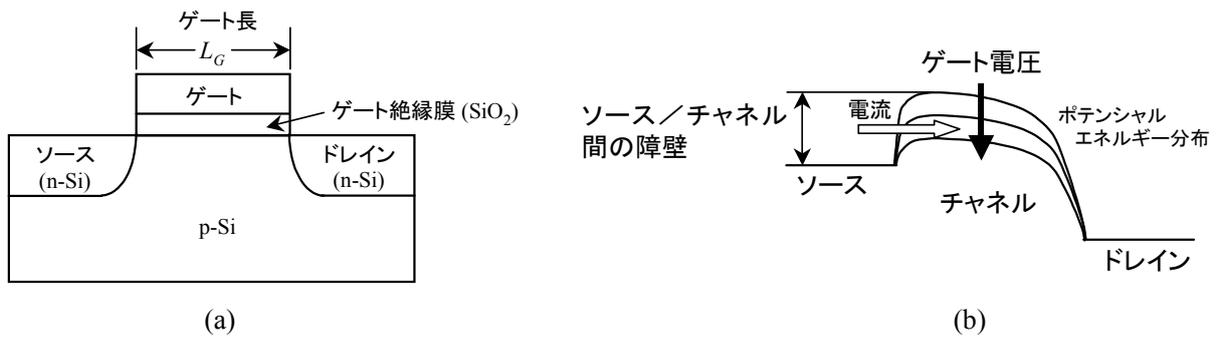


図 9. (a) MOS トランジスタの構造と(b)動作原理(ポテンシャルエネルギー分布).

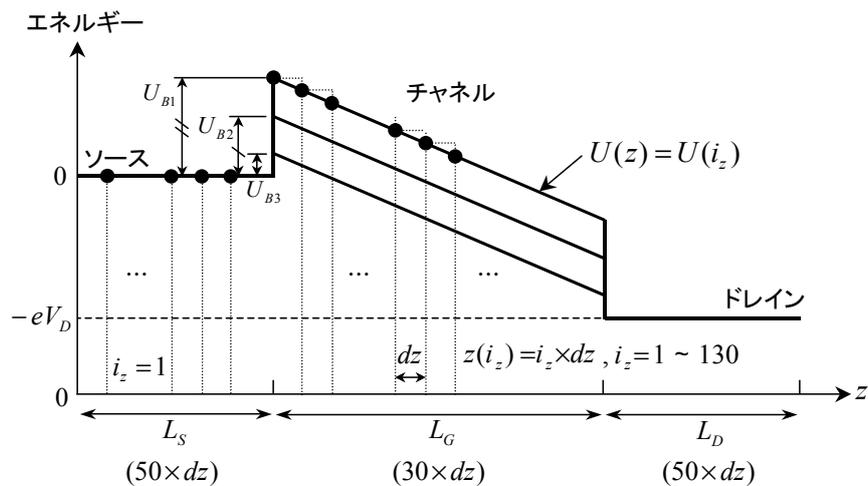


図 10. 擬似 MOS トランジスタモデルの説明.

n チャネル MOS トランジスタの場合、ソースとドレインは n 型でチャネルは p 型になるので、ソースからドレイン方向のポテンシャルエネルギー分布は図 9(b)の実線のようになる。チャネルのポテンシャルエネルギーは、ゲート絶縁膜を介し容量結合したゲート電極によって変化させることができる構造になっている。すなわち、ゲートに与える電圧によってソース/チャネル間の障壁の高さを調整し、流れる電流の大きさを制御している。本実験では、図 9(b)のポテンシャルエネルギー分布を図 10 のように単純化した擬似 MOS トランジスタモデルで計算を行うことにする。

以下の手順を参考にせよ(最初は Si で行うのが良い)。

- (1) ソース/チャネル間の障壁の高さ U_B を設定する。とりあえず $U_B = 0.02\text{eV}$ (エレクトロンボルト) としておく。
- (2) ドレイン電圧 V_D を設定する。とりあえず $V_D = 0.4\text{V}$ (ボルト) としておく。
- (3) ソース長 L_S 、ゲート長 L_G 、ドレイン長 L_D を設定する。ソースとドレインの長さは、平均自由工程よりも長くしておく ($L_S = L_D = 50\text{nm}$ で固定)。ゲート長は可変とするが、とりあえず $L_G = 30\text{nm}$ としておく。
- (4) ポテンシャルエネルギー分布 $U(z)$ を与える。その際、位置座標 z を分割幅 dz で離散化する必要がある。図 10 を参考にして、まず z 座標を $z(i_z) = i_z \times dz$ と与える。そして、ポテンシャルエネルギー

ギー分布を以下のように与える。

$$U(z) = U(i_z) = \begin{cases} 0 & , z < L_S \\ U_B - (z - L_S) \times eV_D / L_G & , L_S < z < L_S + L_G \\ -eV_D & , L_S + L_G < z \end{cases} \quad (29)$$

分割幅を $dz = 1\text{nm}$ とした場合、ソースとドレインは 50 分割 ($L_S = L_D = 50\text{nm}$)、チャネルは 30 分割 ($L_G = 30\text{nm}$) になる。

(5) 次に、次式を用いて z 方向の電界分布を計算する。

$$E_z(z) = -\frac{d\phi(z)}{dz} = -\frac{d}{dz} \left(-\frac{U(x)}{e} \right) = \frac{1}{e} \frac{dU(z)}{dz} \quad \text{より} \quad E_z(i_z) = \frac{1}{e} \frac{U(i_z+1) - U(i_z-1)}{2dz} \quad (30)$$

(6) 粒子の初期配置: ソースとドレイン内に、同数の粒子 (例えば 50 個ずつ) を配置する。

(7) 粒子の初期速度: 熱速度を与えるため、次式を用いる。

$$E_k = -k_B T \log(r) \quad (31)$$

$$v = \sqrt{\frac{2E_k}{m}} \quad (32)$$

$$v_x = v \sin \theta \cos \phi \quad (33)$$

$$v_y = v \sin \theta \sin \phi \quad (34)$$

$$v_z = v \cos \theta \quad (35)$$

k_B はボルツマン定数 (付録 D)、 T は温度、 r は 0 と 1 の間の一様乱数である。本実験では、温度は室温 ($T = 300\text{K}$) とせよ。なお、 ϕ 、 θ は 6.1 節と同様に与えればよい。

(8) x と y 方向の取り扱い (境界条件を含む) は、これまでと同様とする。

検討課題の例

1. 電流-電圧特性 ($I_D - V_D$ 特性) の障壁の高さ (U_B) 依存性。電流 I_D の計算方法は、9. 電流密度の計算方法(II)が適している。目標: ソース・ドレイン間を流れる電流が、障壁の高さ (\approx ゲート電圧) で制御されることを示し理解する。
2. $I_D - V_D$ 特性のゲート長 (L_G) 依存性。チャネル内の散乱回数のゲート長依存性を計算することも可能である。目標: 微細化により MOS トランジスタの電流値が増大することを示し、スケールリング則の基本を理解する。
3. 電子密度分布 $n(z)$ と z 方向平均速度分布 $v_z(z)$ の計算。これらは位置 z の関数になるので、各位置座標 $z(i_z)$ に存在する電子の時間平均を取ることになる。目標: 障壁の高さによりチャネル内に誘起される電子密度が変調され、さらに電子がチャネル内で加速されることを示し理解する。
4. 高移動度材料である Ge や GaAs の MOS トランジスタも試し、Si MOS トランジスタの特性と比較する。目標: MOS トランジスタのチャネルに高移動度材料を導入することの利点を理解する。

上記に挙げた検討課題の他、P. 11-12 の自由課題 A~D と組み合わせた計算も可能である。試してみよ。

F. 過渡応答

1. z 方向に電界を与えて電子の平均速度が定常値に落ち着いた後に、電界をゼロに戻したときの電子の過渡応答を調べる。

- z 方向の平均速度の時間変化を計算する。最終的に平均速度はゼロになるが、それまでに要する時間は何かで決まるか？
- 定常時の電界の値を速度-電界特性の線形領域と飽和領域に設定した場合で、上記の過渡応答に違いは現れるか？
- 光学フォノンおよび音響フォノンの散乱確率(W_1, W_0)を変えた時の影響は？

付録 A: オイラー法による運動方程式の解法

時刻 t における i 番目の電子の座標を $\mathbf{r}_i(t) = (x_i(t), y_i(t), z_i(t))$ 、その時刻でその電子に働く力を $\mathbf{F}_i(t)$ とすると(ここで力 \mathbf{F} には電界から受ける力、他の電子から受ける力、不純物から受ける力などが全て含まれるとする)、ニュートンの運動方程式は次のようになる。

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i(t)}{dt^2} = \mathbf{F}_i(t) \quad (\text{A.1})$$

これは次の二つの式に分けて書く事が出来る。

$$\frac{d\mathbf{r}_i(t)}{dt} = \mathbf{v}_i(t) \quad (\text{A.2})$$

$$\frac{d\mathbf{v}_i(t)}{dt} = \frac{\mathbf{F}_i(t)}{m_i} \quad (\text{A.3})$$

まず最初の式(A.2)の左辺の時間微分を

$$\frac{d\mathbf{r}_i(t)}{dt} \cong \frac{\mathbf{r}_i(t+\Delta t) - \mathbf{r}_i(t)}{\Delta t} \quad (\text{A.4})$$

と近似する。すると式(A.2)から

$$\mathbf{r}_i(t+\Delta t) \cong \mathbf{r}_i(t) + \mathbf{v}_i(t)\Delta t \quad (\text{A.5})$$

が得られる。同様に、式(A.3)の左辺の時間微分を

$$\frac{d\mathbf{v}_i(t)}{dt} \cong \frac{\mathbf{v}_i(t+\Delta t) - \mathbf{v}_i(t)}{\Delta t} \quad (\text{A.6})$$

と近似すると、式(A.3)から

$$\mathbf{v}_i(t+\Delta t) \cong \mathbf{v}_i(t) + \frac{\mathbf{F}_i(t)}{m_i} \Delta t \quad (\text{A.7})$$

が得られる。従って、初期位置 $\mathbf{r}_i(t=0)$ と初期速度 $\mathbf{v}_i(t=0)$ が与えられれば、今得られた2つの式

$$\mathbf{r}_i(t+\Delta t) \cong \mathbf{r}_i(t) + \mathbf{v}_i(t)\Delta t \quad (\text{A.8})$$

$$\mathbf{v}_i(t+\Delta t) \cong \mathbf{v}_i(t) + \frac{\mathbf{F}_i(t)}{m_i} \Delta t \quad (\text{A.9})$$

を用いて粒子(ここでは電子)の運動の軌跡を求める事が出来る。ここで述べた方法はオイラー法と呼ばれ、微分方程式の数値解法の中で最もシンプルなものである。

付録 B: 自由走行時間 τ

まず電子が時間 τ だけ自由走行し、その後に散乱される確率 $P(\tau)$ を求める。散乱確率が W_0 (1/s) のとき、電子が時刻 t から $t + \Delta t$ までの間に散乱される確率は $W_0 \Delta t$ となる。 $P_{free}(t)$ を時刻 t までの間に散乱を受けない確率とすると、さらに時刻 $t + \Delta t$ までの間に散乱を受けない確率 $P_{free}(t + \Delta t)$ は

$$P_{free}(t + \Delta t) = P_{free}(t)(1 - W_0 \Delta t) \quad (B.1)$$

と表される。この左辺をテイラー展開し

$$P_{free}(t) + \frac{dP_{free}(t)}{dt} \Delta t \cong P_{free}(t)(1 - W_0 \Delta t) \quad (B.2)$$

さらに整理すると

$$\frac{dP_{free}(t)}{dt} \cong -P_{free}(t)W_0$$

より

$$P_{free}(t) \cong C \exp\left[-\int_0^t W_0 dt'\right] = \exp(-W_0 t) \quad (B.3)$$

が得られる。ただし $t = 0$ で自由走行が始まるとして $C = 1$ とした。式(B.3)を用いると、電子が時間 τ だけ自由走行し、その後に散乱される確率 $P(\tau)$ は

$$P(\tau) = P_{free}(\tau) \times W_0 = W_0 \exp(-W_0 \tau) \quad (B.4)$$

となる。これを变形して

$$\frac{P(\tau)}{W_0} = \exp(-W_0 \tau) = r \quad (B.5)$$

とすると上式は 0~1 の値をとるので、これを乱数 r [0~1] で与えることにより式(11)が導かれる。

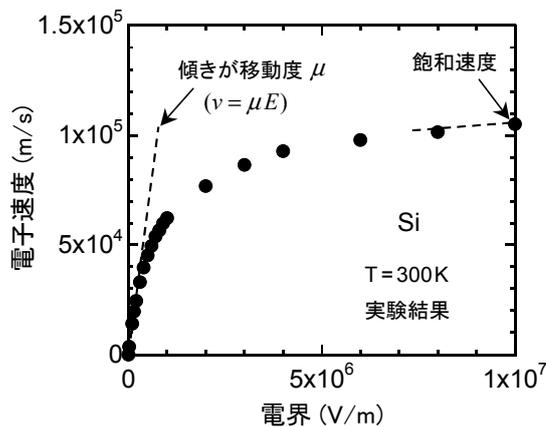
付録 C: 主要半導体の材料パラメータ

	電子有効質量 $m(m_0)$	誘電率 $\epsilon_r(\epsilon_0)$	光学フォノンエネルギー E_{op} (eV)	電子移動度(実験値) μ (cm ² /Vs)	飽和速度(実験値) v_{sat} (m/s)
Si	0.33	11.7	0.060	1450	1×10^5
Ge	0.082	16.0	0.037	—	—
GaAs	0.067	12.0	0.035	—	—

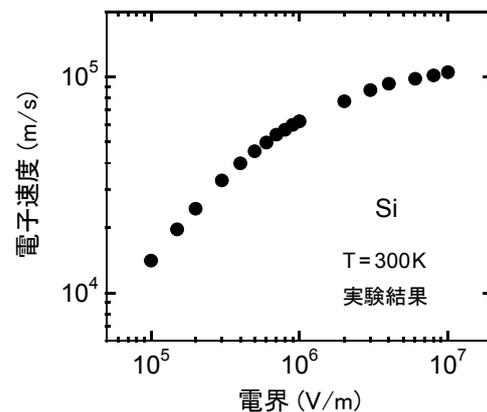
付録 D: 物理定数

自由電子の質量	$m_0 = 9.109 \times 10^{-31}$ kg
電子の素電荷	$e = 1.6022 \times 10^{-19}$ C
ボルツマン定数	$k_B = 1.38 \times 10^{-23}$ J/K
真空誘電率	$\epsilon_0 = 8.854 \times 10^{-12}$ F/m

付録 E: シリコンの速度－電界特性(実験結果)



(a) 線形表示



(b) 両対数表示

参考文献

- [1] 土屋英昭, “ナノ構造エレクトロニクス入門”, コロナ社, 2013年9月.
- [2] 富澤一隆, “半導体デバイスシミュレーション —CG で可視化するサブミクロンデバイスの世界—”, コロナ社, 1996年.
- [3] Y. Zhao, H. Matsumoto, T. Sato, S. Koyama, M. Takenaka, and S. Takagi, *IEEE Trans. on Electron Devices*, vol. 57, no. 9, pp. 2057-2066, 2010.
- [4] 橋本洋志, 小林裕之, “OpenGL による 3 次元 CG アニメーション”, オーム社, 2005年.
- [5] 床井浩平, “GLUT による OpenGL 入門”, 工学社, 2005年.
<http://www.wakayama-u.ac.jp/~tokoi/opengl/libglut.html>
- [6] 福井大学工学部 古石貴裕先生による「分子シミュレーション」のページ.
http://polymer.apphy.fukui-u.ac.jp/~koishi/lecture/mol_sim.html