

**科学研究費助成事業 研究成果報告書**

平成 29 年 6 月 6 日現在

機関番号：14501

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2013～2016

課題番号：25289102

研究課題名(和文)京コンピュータを用いたアトミスティック・デバイスシミュレータの開発

研究課題名(英文)Development of an Atomistic Device Simulator by High Performance Computer

研究代表者

小川 真人(Ogawa, Matsuto)

神戸大学・工学(系)研究科(研究院)・教授

研究者番号：40177142

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 13,400,000円

研究成果の概要(和文)：超LSI技術を支えてきた電界効果型トランジスタ(FET)の微細化の進展が維持されると、2020年頃には、デザインルールがサイズで11nm、原子数で千～数万個のオーダーに達する。シリコンナノワイヤやシリコンとの複合材料あるいは新しい材料・構造を用い、かつ、構成原子の電子状態と電子の波動性を量子力学的にとらえるデバイス設計・開発が必要になる。そこで出現する物理現象を構成原子の個性を考慮でき、量子論に基づいて第一原理的に予測し理解することができるシミュレータ(「京」コンピュータ利用を想定したトランジスタ特性シミュレータ)を開発した。

研究成果の概要(英文)：Since the miniturization of FETs (field effect transistor) is accelerated year by year, the size of an FET in 2020 will become as small as 11 nm, which is comprised of several thousand of atoms. In such small-scaled transistor, wave nature of electrons plays an important roles, in addition, the characteristics of atoms have to be taken into account in order to design and fabricate these devices. We have developed a simulator, which can be used on K-computer, where the device physics can be taken into account on the basis of quantum physics as well as first principles calculation.

研究分野：半導体電子工学

キーワード：ナノデバイスシミュレーション 非平衡グリーン関数法 第一原理計算 強束縛近似法 電界効果型トランジスタ 原子膜デバイス

### 1. 研究開始当初の背景

LSI 技術を支える CMOS トランジスタ技術においては、スケーリング則に基づくデバイスの微細化に伴ってナノメートルスケールのデバイスが作成され、1つのトランジスタを構成する原子数も数千原子となり、個々の原子の特性が顔を出すとともに、ソースドレイン間トンネル電流やゲートリーク電流等の電子の量子力学的効果がデバイス特性に大きく影響するようになってきている。一方で、微細化のみによる素子性能向上も困難になりつつあり、新しい構造 (Fin 構造, ナノワイヤ構造) や新材料 (III-V 族半導体, 原子膜材料) を用いたデバイスが提案・検討されているが、微細化に伴う製造コストの上昇は素子開発のターンアラウンドタイムを増加させ、半導体産業の体力を奪う要因となっており、高精度で高速な原子スケールからの量子デバイスシミュレータの開発が望まれている。

### 2. 研究の目的

本研究の主目的は、ナノメートルスケールの新構造、新材料半導体デバイス中のキャリア輸送において出現する物理現象を量子論に基づいて第一原理的に予測することができる原子論的マルチフィジクス・マルチスケール量子輸送シミュレータを開発し、デバイスとして最も適した構造や材料を効率的に探索できる環境を構築すること、および、それを広く日本の産学界に提供し、今後の半導体デバイス研究に寄与することである。

近年の半導体技術を支えてきた電界効果型トランジスタ (FET) の微細化の進展が維持されると、2020 年頃には、デザインルールがサイズで 11nm, 原子数で千~数万個のオーダーに達すると予測され、シリコンナノワイヤやシリコンとの複合材料あるいは新しい材料・構造を用い、かつ、構成原子の電子状態と電子の波動性を量子力学的にとらえるデバイス設計・開発が必要になる。そこで出現する物理現象を構成原子の個性を考慮でき、量子論に基づいて第一原理的に予測し理解することができるシミュレータ (「京」コンピュータ利用を想定したトランジスタ特性シミュレータ) を開発し、さらに、デバイスにおける発熱効果を予測するための知見を得、それらを用いて今後のナノスケールデバイスとして最も適した原子配置 (構造) や材料を効率的に探索することが本研究の目的である。一方で、半導体産業や大学の研究室で、各研究者がデバイス設計を行う際には、大規模並列計算を前提としたシミュレータだけでなく、より計算負荷の軽いシミュレータや、直感的なシミュレータの操作を実現する GUI 環境の構築も重要であり、これらも本研究のターゲットとする。

### 3. 研究の方法

プロトタイプ量子輸送シミュレータを、より大規模化に適したものにし、ユーザー

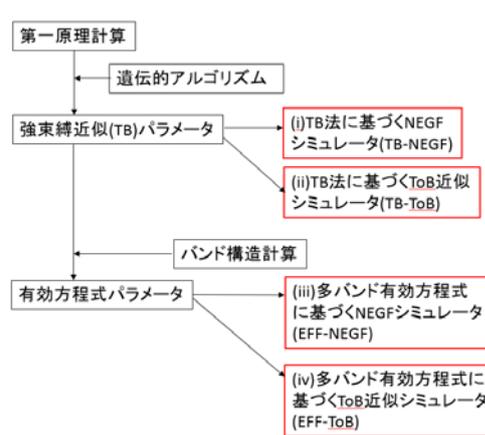


図1. 開発したシミュレータの階層構造

にとって使いやすいものにするため、次のような方針で進めた。現在のプロトタイプシミュレータはシリコン系技術と化合物半導体に対応できるが、グラフェン等原子膜材料との複合構造デバイスにも対応し得る汎用性を持たせるために、任意の結晶系に対する強束縛 [Tight-Binding (TB)] 近似ハミルトニアンを第一原理密度汎関数法に基づくバンド構造計算結果から生成するアルゴリズムを開発する。それをもとに、現在の原子論的な TB-NEGF 法 (強束縛近似グリーン関数法) を、より複雑な半導体材料の特性を反映させたデバイス輸送特性解析を可能とする手法として発展させる。また、TB 法で原子軌道関数を用いた場合、大きなデバイスサイズでは、メモリおよび CPU 時間の面で計算が困難であるため、有効方程式近似に基づくシミュレータを平行して構築し、シミュレーションの高速化を図る。

### 4. 研究成果

#### (1) 開発した量子輸送シミュレータの全体像

本研究において開発した種々のナノスケール FET シミュレータの階層構造を図 1 に示す。まず、第一原理計算によって得られたバンド構造から、TB 近似モデルのパラメータを遺伝的アルゴリズムに基づいて抽出するプログラムを作成した。具体的には、密度汎関数法による第一原理電子構造計算プログラム WIEN2k の出力ファイルを入力ファイルとして読み込み、それをターゲットとして、TB 法によって種々の原子軌道基底セット (sp3, sp3s\*, sp3s\*d5, スピン軌道相互作用の考慮等) を用いて得られるバンド構造がターゲットのバンド構造に一致するような、最適な TB パラメータ (原子軌道エネルギー, 最近接原子間飛び移りエネルギー, スピン分離エネルギー) の値を自動的に抽出できるプログラムを作成した。

得られた TB パラメータは、本研究において作成した (i) TB 法と NEGF 法に基づく FET シミュレータ (TB-NEGF), 及び、(ii) TB 法と障壁高さモデル [Top-of-Barrier (ToB) モデル] に基づく FET シミュレータ (TB-ToB) において直接的に用いる事ができる。前者の

TB-NEGF においては、再帰グリーン関数法アルゴリズムを効率的にコーディングする事により、大規模化に適したシミュレータを実現し、また、「京」と同一のアーキテクチャを持つスーパーコンピュータである  $\kappa$ -computer (計算科学教育センター) 上での動作を確認している. (i), (ii) 両手法ともに、ポアソン方程式との自己無撞着計算により、電流のゲート制御におけるキャリア誘起の影響を適切に考慮している. また、前者 (i) のモデルでは短チャンネル時により重要となるチャンネル内ポテンシャル分布の詳細や量子トンネル効果を近似無しに考慮しているのに対し、後者 (ii) のモデルでは、長チャンネル FET を前提とし、チャンネル内ポテンシャル分布は均一であるという仮定を置くことにより、計算負荷の大幅な低減を可能にしている. しかしながら、チャンネル/電極間での実効キャパシタンスを付加する事による短チャンネル効果 (障壁低下効果) の考慮や、半古典近似法 (WKB 近似) による量子トンネル効果の考慮なども可能である事を明らかにしている. これら、(i) TB-NEGF モデル、(ii) TB-ToB モデルを併用する事により、素子特性の概略を計算負荷の軽い TB-ToB モデルで押さえ、その知見に基づいて TB-NEGF モデルを用いてより詳細な計算を行うなど、より戦略的なデバイスデザインが可能になる. それだけでなく、(i) で得られた短チャンネル効果などを (ii) で再現できるような実効パラメータ (ソース/ドレインキャパシタンスなど) を抽出する事による、デバイス内の物理現象の本質的な理解をも深める事も可能になる.

本研究では更に、TB 法で得られるバンド構造のうち電気伝導に主に寄与するフェルミエネルギー付近の振る舞いに焦点を当てた、有効方程式モデルに基づく量子輸送シミュレータも構築した. 具体的には、伝導帯下端付近及び価電子上端のバンド構造を再現するような多バンド有効方程式を摂動展開により求め、その方程式を離散化することで、NEGF シミュレータへの実装を行った [(iii) EFF-NEGF モデル]. この手法は TB-NEGF よりも計算負荷が軽減されている一方で、短チャンネル効果や量子トンネル効果を付加的パラメータ無しに考慮できる. 更に、有効方程式をベースとした ToB モデル [(iv) EFF-ToB モデル] によるシミュレーションも可能である.

これら (i)-(iv) によって構成される量子輸送シミュレータの階層構造を積極的に活用する事で、シミュレーションによる FET のデザインをより系統的且つ戦略的に行う事が可能になる. 第一原理バンド計算と遺伝的アルゴリズムによる TB パラメータ抽出を起点とした本シミュレーションプログラムは、チャンネルとして用いる材料の種類を問わず適用可能である.

## (2) 原子膜ヘテロ構造デバイスへの適用

本研究で構築したシミュレータを、近年実験的作成が試みられている原子膜ヘテロ構造デバイスのシミュレーションに適用した事例を 2 例示す.

(2-1) 歪みグラフェンチャネル FET のシミュレーションによる性能予測 (発表論文 3, 5, 学会発表 5)

面内引張歪みを印加したグラフェンをチャネルとし、それを無歪みグラフェンで挟んだ面内ヘテロ構造 FET を提案し [図 2(a)], 歪みをグラフェンのアームチェア軸方向に印加した場合、ヘテロ界面で実効的に発生する擬似磁場効果に起因して、バンドギャップが存在しないにも係わらず数桁以上の電流のオンオフ比が得られる事、更に、バンド間トンネル FET と同等の機構により、通常の FET におけるスイッチング性能の熱的限界である 60 mV/decade の S 値よりも更に優れたスイッチング性能を示しうる事を、TB-NEGF 法を用いた計算によって明らかにした. また、この素子の特性におけるフォノ

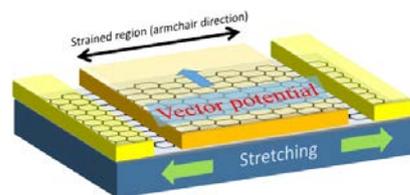


図 2(a) 歪みグラフェン FET の概念図

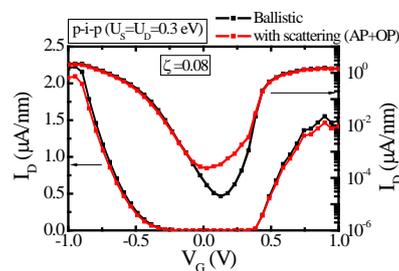


図 2(b) 歪みグラフェン FET (歪み率 8%) における電流のゲート電圧依存性の一例. フォノン散乱の考慮の有無での比較をしている.

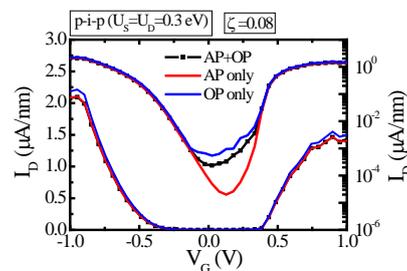


図 2(c) 歪みグラフェン FET (歪み率 8%) における電流のゲート電圧依存性の一例. 音響フォノン (AP), 光学フォノン (OP) 散乱の影響の違いを比較している.

ン散乱の影響を EFF-NEGF 法を用いて調べ、光学フォノン散乱に起因してオフ時の電流が有意に劣化 (増大) するものの、擬似磁場効果に起因する電流の遮断機構自体は、フォノン散乱に対してロバストなものである事を明らかにした [図 2(b, c)].

(2-2) グラフェン状物質をチャンネルとした面内ヘテロ構造 FET (学会発表 1)

近年, h-BN (六方晶窒化ホウ素) に炭素原子をある一定の割合で混合させた h-BCN 構造に関する研究が, 実験的な作成事例も複数報告されるなど盛んに行われている. この物質は, 理想的には, グラフェンで実現されているディラック形線形分散において有限なギャップを持たせた有限ギャップディラック電子系として振舞う事が期待される. そのため, そのような有限ギャップディラック電子系をチャンネルに用いた FET [図 3(a)] が, 従来のシュレーディンガー電子をチャンネルに用いた FET と, バンドギャップやバンド端有効質量を揃えて比較した場合に, どのような違いがあるか, 特に FET 性能としての観点での比較から明らかにする事が重要である. 本研究では, いくつかのチャンネル長に対して, 有限ギャップディラック電子

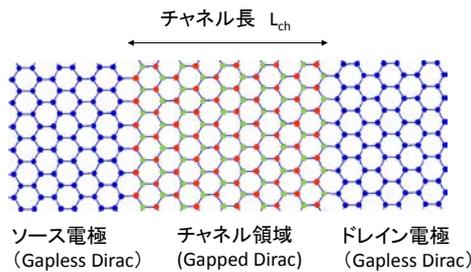


図 3(a)有限ギャップディラック電子チャンネル FET の概念図

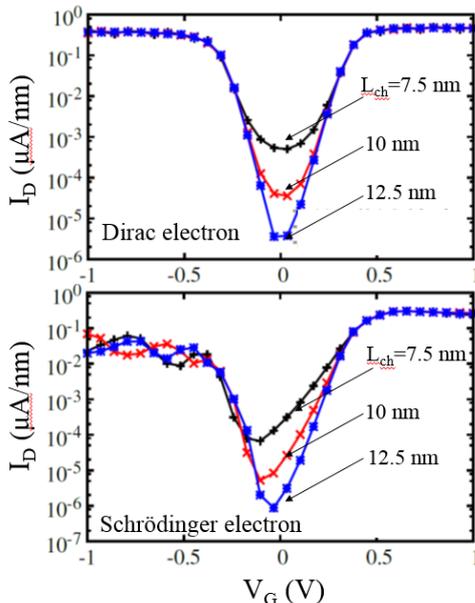


図 3(b)ディラック電子チャンネル FET (上) とシュレーディンガー電子チャンネル FET (下) における電流のゲート電圧依存性. 異なるチャンネル長での結果を比較している.

系チャンネル FET とシュレーディンガー電子チャンネル FET の性能の比較を, 2 バンド有効方程式モデルに基づいて行った. このような, 電子の従う有効方程式の本質的違いによる性能比較が行えるのは, 本研究で開発した有効方程式モデルの利点である. 図 3(b) が両者の比較を行った結果であるが, これらの結果の詳細な比較の結果, バンド端有効質量を同一とした場合, ディラック型分散の方がシュレーディンガー型分散に比べ同じチャンネル長に対してより優れたスイッチング特性 (低い S 値) を示しうる事が明らかとなった.

### (3) 非平衡グリーン関数法に基づく量子輸送シミュレータの GUI 実装

本研究の成果である量子輸送シミュレータを, ユーザーが直感的に利用できるような環境を構築する事を目的に, Python 言語を用いた GUI インターフェースを構築した. 量子輸送シミュレータのプログラム本体は C 言語を用いて通常の CUI プログラムとして構築されているが, そのプログラムにおいて用いられるパラメータの書かれた入力ファイル



図 4. GUI インターフェースにおけるパラメータ入力画面

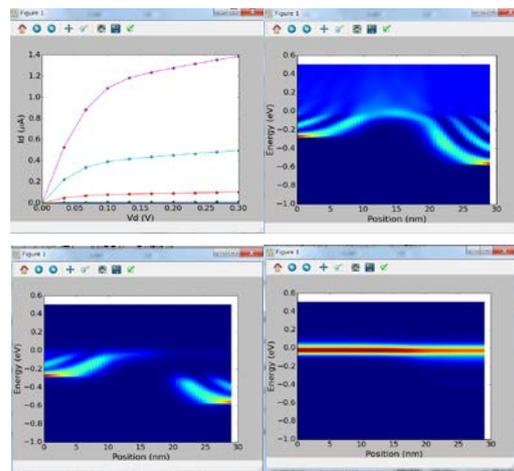


図 5. GUI インターフェース経由で出力されるシミュレーション結果 (GaAs ナノワイヤ FET の一例).  $I_d$ - $V_d$  特性 (左上), 局所状態密度分布 (右上), 電子密度スペクトル分布 (左下), 電流スペクトル分布 (右下).

ルの作成, プログラムの実行, そして結果の可視化に至るまでの全てを, 一貫してこの GUI インターフェース経由で行えるようになっていいる. 従って, ユーザーはファイルの編集やターミナルからのコマンド入力等の作業を一切行わずに感的にシミュレーションを実行する事ができる. 更に, Python 言語で書かれている事の利点として, 使用する OS に依存せずこの GUI インターフェースを利用する事が可能である. 図 4 に, GUI インターフェースからのパラメータ入力画面, 図 5 に, GUI インターフェースからのプロットボタンのクリックによって出力される各種グラフを示している. 電流電圧特性だけでなく, 局所状態密度や電子密度スペクトル, 電流スペクトル等の局所量の可視化も可能である. この事例は, EFF-NEGF に基づく, 音響・光学フォノン散乱を考慮したナノワイヤ FET のシミュレーション結果であるが, 図 4 右下図で観察されるように, 光学フォノン散乱による非弾性散乱に起因して電流スペクトルが輸送方向に沿ってどのように変化していくかについての可視化も可能となっている.

#### 5. 主な発表論文等

(研究代表者, 研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 13 件)

1. K. Tada, T. Funatani, S. Konabe, K. Sasaoka, M. Ogawa, S. Souma and T. Yamamoto, Modulations of thermal properties of graphene by strain-induced phonon engineering, Jpn. J. Appl. Phys. Vol. 56, pp. 025102 1-6 (2017). (査読あり)  
DOI: <https://doi.org/10.7567/JJAP.56.025102>
2. M. Ichii, R. Ishida, H. Tsuchiya, Y. Kamakura, N. Mori, M. Ogawa, Computational Study of effects of surface roughness and impurity scattering in Si junctionless transistors, IEEE Trans. on Electron Devices, Vol. 62, pp. 1255-1261 (2015). (査読あり)  
DOI: 10.1109/TED.2015.2399954
3. 相馬聡文, 田中未来, 市原圭祐, 迫田翔太郎, 笹岡健二, 小川真人, 歪みグラフェンを用いたディラック電子エンジニアリング素子のシミュレーション, 信学技報 IEICE Technical Report SMD2015-89, pp. 29-34 (2015). (査読なし)  
URL: <http://ci.nii.ac.jp/naid/40020677792>
4. A. Mehdipour, M. Ogawa, and S. Souma, Intermediate band electron wave function localization effect on the efficiency limits of InAs/GaAs quantum dot solar cell, *Memoirs of the Graduate Schools of Engineering and System Informatics Kobe University*, No. 6, pp. 18-24, (2014) (査読あり)  
DOI: 10.5047/gseku.e.2014.00
5. S. Souma, M. Ueyama, and M. Ogawa, Simulation-based design of a strained graphene field effect transistor incorporating the pseudo magnetic field effect, *Appl. Phys. Lett.*, Vol. 104, pp. 213505 1-4 (2014). (査読あり)  
DOI: <http://dx.doi.org/10.1063/1.4880579>
6. S. Souma and M. Ogawa, Pure spin current induced by adiabatic quantum pumping in zigzag-edged graphene nanoribbons, *Appl. Phys. Lett.*, Vol. 104, pp. 183103 1-4 (2014). (査読あり)  
DOI: <http://dx.doi.org/10.1063/1.4873580>
7. Y. Furubayashi, M. Ogawa, S. Souma, Numerical simulation of current noise caused by potential fluctuation in nanowire FET with an oxide trap, *Proc. of International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices*, pp. 201-204 (2014). (査読あり)  
DOI: 10.1109/SISPAD.2014.6931598
8. A. Mehdipour, K. Sasaoka, M. Ogawa, and S. Souma, Strain-induced modulation of anisotropic photoconductivity in graphene, *Jpn. J. Appl. Phys*, Vol. 53, pp. 115103 1-7 (2014). (査読あり) DOI: <https://doi.org/10.7567/JJAP.53.115103>
9. A. Mehdipour, K. Sasaoka, M. Ogawa, and S. Souma, Proposal of simplified model for absorption coefficients in quantum dot array based intermediate band solar cell structure, *IEICE Electronics Express*, Vol. 11, pp. 20140548 1-11, (2014). (査読あり)  
DOI: <http://doi.org/10.1587/elex.11.20140548>
10. S. Kaneko, H. Tsuchiya, Y. Kamakura, N. Mori, M. Ogawa, Theoretical performance estimation of silicene, germanene, and graphene nanoribbon field effect transistors under ballistic transport, *Applied Physics Express*, Vol. 7, pp. 35102 1-4 (2014) (査読あり) DOI: <https://doi.org/10.7567/APEX.7.035102>
11. S. Koba, M. Ohmori, Y. Maegawa, H. Tsuchiya, Y. Kamakura, N. Mori, M. Ogawa, Channel length scaling limits of III-V channel MOSFETs governed by source-drain direct tunneling, *Jpn. J.*

Appl. Phys. Vol. 53, pp. 04EC10 1-5 (2014). (査読あり) DOI: <https://doi.org/10.7567/JJAP.53.04EC10>

12. H. Hirai, H. Tsuchiya, Y. Kamakura, N. Mori, and M. Ogawa, Electron mobility calculation for graphene on substrates, J. Appl. Phys. Vol. 116, pp. 083703 1-6 (2014). (査読あり) DOI: <http://dx.doi.org/10.1063/1.4893650>
13. 相馬 聡文, 貝野昭造, 小川 真人, 強結合分子動力学法を用いたグラフェンナノリボンの機械的変形と電子状態に関するシミュレーション, シリコンテクノロジー分科会 第 162 回 研究集会 論文集, pp. 30-35 (2013). (査読なし).

[学会発表] (計 15 件)

1. 橋本 悠希, 市原 圭祐, 田中 未来, 笹岡 健二, 小川 真人, 相馬 聡文, グラフェン状物質の面内ヘテロ構造を用いた FET の性能予測シミュレーション, 第 77 回 応用物理学会秋季学術講演会, 2016.9.13, 朱鷺メッセ (新潟県)
2. 中井 雄紀, 石橋 純, 加藤 大喜, 笹岡 健二, 小川 真人, 相馬 聡文, グラフェンナノリボンの電子輸送特性に現れる過渡振動現象に関する理論的研究, 第 77 回 応用物理学会秋季学術講演会, 2016.9.3, 朱鷺メッセ (新潟県)
3. 名村 太希, 迫田 翔太郎, 笹岡 健二, 小川 真人, 相馬 聡文, 任意の方向に歪みが印加されたグラフェンの量子ダイナミクスシミュレーション, 第 77 回 応用物理学会秋季学術講演会, 2016.9.13, 朱鷺メッセ (新潟県)
4. S. Souma, K. Sasaoka, K. Ichihara, S. Sakoda, Y. Hashimoto, T. Namura and M. Ogawa, Computational study on the performance of locally strained graphene devices: transport and wave packet dynamics simulations, 19th Int. Conf. on Superlattices, Nanostructures and Nanodevices, 2016.7.26, City University of Hong Kong (Hong Kong).
5. 相馬 聡文, 笹岡 健二, 小川 真人, 歪み誘起擬似磁場を利用したグラフェン FET の制御における電子-フォノン散乱の影響, 第 63 回 応用物理学会春季学術講演会, 2016.3.20, 東京工業大学大岡山キャンパス (東京都)
6. 加藤 大喜, 笹岡 健二, 小川 真人, 相馬 聡文, 歪み印加されたグラフェンナノリボンの過渡電気伝導現象の数値解析, 第 63 回 応用物理学会春季学術講演会, 2016.3.20, 東京工業大学大岡山キャンパス (東京都)
7. 迫田 翔太郎, 笹岡 健二, 小川 真人, 相馬 聡文, グラフェンの歪み/無歪み遷移領域におけるガウス波束の伝播に関する量子ダイナミクスシミュレーション, 第 63 回 応用物理学会春季学術講演会 2016.3.20, 東京工業大学大岡山キャンパス (東京都)
8. 市原 圭祐, 笹岡 健二, 小川 真人, 相馬 聡文, 歪みグラフェン p-n 接合ダイオードの整流特性に関する量子輸送シミュレーション, 第 63 回 応用物理学会春季学術講演会, 2016.3.20, 東京工業大学大岡山キャンパス (東京都)
9. 迫田 翔太郎, 笹岡 健二, 小川 真人, 相馬 聡文, 時間依存波束伝播法を用いた歪みグラフェンの量子ダイナミクスシミュレーション, 第 76 回 応用物理学会秋季学術講演会, 2015.9.15, 名古屋国際会議場 (愛知県)
10. 加藤 大喜, 笹岡 健二, 小川 真人, 相馬 聡文, 開放系シュレーディンガー方程式を用いた歪みアームチェア型グラフェンナノリボンの時間依存電気伝導特性の解析, 第 76 回 応用物理学会秋季学術講演会, 2015.9.15, 名古屋国際会議場 (愛知県)
11. 市原 圭祐, 笹岡 健二, 小川 真人, 相馬 聡文, 歪みグラフェン p-n 接合の電気伝導特性に関する量子輸送シミュレーション, 第 76 回 応用物理学会秋季学術講演会, 2015.9.15, 名古屋国際会議場 (愛知県)
12. 田中未来, 笹岡 健二, 小川 真人, 相馬 聡文, ディラック電子をキャリアとする FET の性能予測シミュレーション, 第 75 回 応用物理学会秋季学術講演会, 2014.9.18, 北海道大学 (北海道)
13. 上山真之, 笹岡 健二, 小川 真人, 相馬 聡文, 擬似磁場効果を利用した歪みグラフェン FET の準解析的モデル提案, 第 75 回 応用物理学会秋季学術講演会 2014.9.18, 北海道大学 (北海道)
14. 森本剛司, 笹岡 健二, 相馬 聡文, 小川 真人, 複雑な断面形状を持つ Si NW MOSFET における量子輸送シミュレーション 第 75 回 応用物理学会秋季学術講演会 2014.9.20, 北海道大学 (北海道)
15. T. Nakano, H. Nagai, M. Ogawa, and S. Souma, Effect of Axial Strain on Switching Behavior of Carbon Nanotube Tunneling Field Effect Transistors, Int. Workshop on Computational Electronics 2013, 2013.6.5, 奈良県新公会堂 (奈良県)

#### 6. 研究組織

##### (1) 研究代表者

小川 真人 (OGAWA, Matsuto)  
神戸大学・大学院工学研究科・教授  
研究者番号: 40177142

##### (2) 研究分担者

相馬 聡文 (SOUMA, Satofumi)  
神戸大学・大学院工学研究科・准教授  
研究者番号: 20432560