

平成 30 年 6 月 15 日現在

機関番号：12102

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2015～2017

課題番号：15H03983

研究課題名(和文) 単原子層FETデバイスにおける電子間クーロン相互作用と室温動作特性の予測

研究課題名(英文) Coulomb Interaction in Atomic-Layer FET Devices and Realistic Prediction of Device Characteristics

研究代表者

佐野 伸行 (SANO, Nobuyuki)

筑波大学・数理物質系・教授

研究者番号：90282334

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 12,600,000円

研究成果の概要(和文)：チャネル領域に単原子層(MoS<sub>2</sub>)を用いたFET構造のモンテカルロ・シミュレータを構築した。高エネルギー電子状態を精度よく反映させるために、従来のK-valleyだけでなく、有効質量の異方性を正確に導入した高エネルギーQ-valleyを導入した。また、高エネルギー電子によって生じる熱と格子との熱輸送を考慮したモンテカルロ・シミュレーションにより、高電界下での温度を自己無撞着に求め、実験的に観測されている温度と良い一致を示すことを見出した。また、デバイスシミュレーションの理論的枠組みの中での長さのスケールに不整合があり、これを解決する離散不純物モデルを提案した。

研究成果の概要(英文)：We have developed an accurate Monte Carlo simulator applicable to monolayer (MoS<sub>2</sub>) FET devices. In order to take account the high-energy electrons properly, the simulator includes the Q-valleys, which have very strong anisotropic effective masses, as well as the K-valleys. Also, we have investigated the heat transfer between hot electrons under high electric fields and the lattice. We have found that the temperature obtained from the Monte Carlo simulations is consistent with the temperature found experimentally. Furthermore, we have studied the length-scale involved under the theoretical framework of various device simulations to construct a physical model of localized impurity in nanoscale device structures. It was found that the length-scales are inconsistent between the Poisson equation and transport equation, and a new impurity model to overcome such problems is proposed.

研究分野：デバイス物理

キーワード：先端機能デバイス デバイスシミュレーション モンテカルロ法 単原子層 特性ばらつき クーロン相互作用 離散不純物 高電界効果

## 1. 研究開始当初の背景

MoS<sub>2</sub>や Silicene 等の単原子層をチャンネル領域に用いた FET 構造が注目を集めており、この構造のもとでのデバイス特性評価の重要性が増してきていた。このような材料の電子状態に関する第一原理計算は多数報告があるが、輸送特性に関する計算結果は当時ほとんど存在しなかった。第一原理計算と結合した非平衡グリーン関数を用いた評価が複数出始めていたが、室温動作を想定した、フォノン散乱が顕著な拡散的伝導が支配的な領域での散乱理論をベースにした（非平衡グリーン関数のような）量子輸送計算の正当性は定かではない。一方、拡散伝導領域で最も有効なモンテカルロ法による特性評価は、K バレーのみを考慮した最も単純なシミュレーションが殆どであり、バンドのエネルギー幅が小さい単原子層材料で重要となる高電界領域での高エネルギー電子輸送を正確に評価することが困難な状況にあった。

また、単原子層構造のようなナノスケール低次元構造では、イオン化不純物のような局所的なポテンシャル乱れが、デバイス特性評価に大きな影響を及ぼし得る。実際、既存デバイスの微細化を律速しているデバイス特性ばらつきは、このような離散不純物の作る局所的なポテンシャルゆらぎによるものである。しかしながら、ポテンシャルゆらぎを摂動として扱う従来手法では、このような大きなポテンシャル変調を安易にシミュレーションに導入することはできない。しかしながら、非平衡グリーン関数法を中心とした量子的手法では、無摂動ハミルトニアンにこのようなポテンシャル変調を直接導入する手法が今も一般的である。このような局所的なポテンシャルゆらぎの導入方法については、すでに我々のグループが物理的考察を進めており、既存デバイスの古典的シミュレーション手法のために提唱した離散不純物モデルは、主要な二つのモデルの一つとして既に認知されて世界的シミュレータの全てに実装されている。単原子層 FET 構造においても、局所的な不純物に対する同様の物理モデル化が今も求められている。

## 2. 研究の目的

当該申請課題で設定した具体的な研究目的は、以下の5点である。

- (1) MoS<sub>2</sub> をチャンネル材料とするモンテカルロ・シミュレータを構築し、電子の輸送特性を明らかにする。
- (2) 高エネルギー電子によって生じる熱の影響をフォノン数にフィードバックすることで、MoS<sub>2</sub>における高電界効果と熱との相関を明らかにする。
- (3) 構築したモンテカルロ・シミュレータにソースおよびドレインを付加することで、デバイス特性評価を行う。
- (4) 当該グループでこれまで構築してきた、(クーロン相互作用を世界最高精度で導入

できる) 自己無撞着モンテカルロ・シミュレータで単原子層チャンネルを表現し、自己無撞着シミュレーションを実施することで、高濃度領域とチャンネル電子とのクーロン相互作用のデバイス特性への影響を考察する。

(5) 離散不純物による局所的なポテンシャルゆらぎを正確にデバイス・シミュレータに導入するために、デバイス・シミュレーションの理論的枠組みのなかでのポテンシャルゆらぎの物理的役割を明らかにする。そのうえで、種々のデバイス・シミュレータに適用可能な物理モデルの構築を目指す。

## 3. 研究の方法

(1) MoS<sub>2</sub> モンテカルロ・シミュレータの構築においては、高エネルギー電子状態を正確に考慮するため、K バレーのうねに存在する Q バレーを導入する。なお、K バレー下端と Q バレー下端のエネルギー差は実験的にも明らかになっていないため、パラメータとして扱う。また、Q バレーの等エネルギー面は非等方性が強いことから、任意の方向に電場がかけられるようにこの非等方性を正確に導入する。室温での電子輸送に支配的なほぼ全てのフォノン散乱を導入する。K バレー下端と Q バレー下端のエネルギー差をパラメータとして、輸送特性を明らかにする。

(2) 高電界効果と熱との相関に関しては、電子系の実効的温度をモンテカルロ・シミュレーションより抽出し、その温度でフォノンの統計分布を変調させてモンテカルロ・シミュレーションを自己無撞着に実施する。

(3) MoS<sub>2</sub> モンテカルロ・シミュレータによるデバイス特性評価に関しては、ソースおよびドレインを理想的な熱浴と仮定することで、簡易なデバイス構造をモンテカルロ・シミュレータに導入する。

(4) クーロン相互作用を高精度に導入した立体素子構造の自己無撞着モンテカルロ・シミュレータのチャンネル領域の厚さを小さくすることで、擬2次元素子構造にする。その際、境界に接する有限サイズのキャリアの扱いの工夫が必要といる。そのうえで、高濃度ソース/ドレイン領域での長距離クーロン相互作用と素子特性への影響を明らかにする。

(5) 離散不純物のもつクーロン・ポテンシャルによる局所的なポテンシャル揺らぎを長距離成分と短距離成分に分離することで、それぞれの物理的寄与を明らかにする。そのうえで、ポテンシャル揺らぎを正確に反映するための物理モデル化に必要な物理機構を抽出する。

## 4. 研究成果

(1) 理想的な2次元構造を想定したモンテカルロ・シミュレータを構築した。考慮した散乱機構としては、無極性変形ポテンシャルに伴った音響および光学フォノン散乱と有極性相互作用に伴った光学フォノン散乱を考慮した。バレー内音響フォノン散乱では弾

性散乱近似を用いた。電子系に対するバンド構造としては、通常の  $K$  バレーに加えて、有効質量の非等方性の強い  $Q$  バレーを考慮した (図 1 参照)。これは、バンド幅が比較的小さい遷移金属系単原子層構造では、高エネルギー電子の正確なエネルギー分散の導入が本質的に重要となるためである。なお、正確に有効質量の異方性を導入することで、任意の方向に電場がかけられるようにした。電子散乱機構においてもバレーの有効質量の異方性に伴った状態密度も考慮した。まず、 $K$  バレー下端と  $Q$  バレー下端のエネルギー差については統一的な知識が得られていないことから、このエネルギー差をパラメータとして様々な輸送特性を求めた。このエネルギー差は、バレー間散乱の強さを決める最重要パラメータであり、この値の輸送特性への影響を明らかにすることは重要である。図 2 に室温におけるドリフト速度の電場依存性を  $K$  バレー下端と  $Q$  バレー下端のエネルギー差をパラメータとして示す。

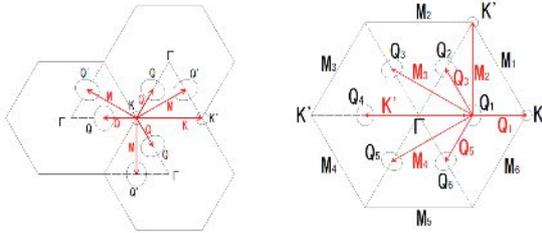


図 1. バレー間散乱とフォノン波数

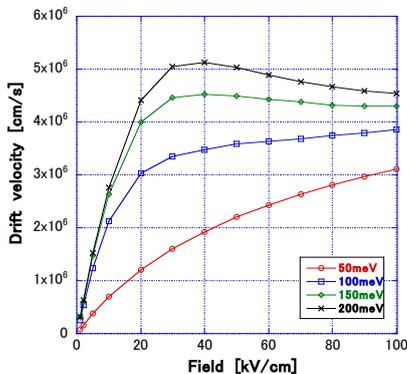


図 2.  $K$  および  $Q$  バレー間のエネルギー差の違いによるドリフト速度の電場依存性

(2) 高電場のもとで高エネルギー化した電子系によって生じる局所的な熱のデバイス特性への影響を検討した。熱の影響を自己無撞着に考慮するために、電子系の実効的温度をモンテカルロ・シミュレーションにより Maxwell 分布を想定して抽出し、その温度で熱的に電子系と格子が局所平衡状態にあると仮定することで、フォノンの統計分布を変調させた。そして、変調させたフォノン統計分布のもとでさらにモンテカルロ・シミュレーションを自己無撞着に行うことで、電子系と熱系との定常状態を実現した。図 3 に熱の

影響を考慮した場合としない場合のドリフト速度の電場依存性を示す。熱の影響を考慮することでフォノン系が高温となり、散乱が強められることでドリフト速度が高電場領域で大幅に抑制されることがわかる。図 4 に電子系 (および格子系) の自己無撞着に求めた温度の電場依存性を示す。デバイス構造で想定される高電界下では 450K 程度の温度となることがわかるが、この値は実験的に観測されている温度とよく一致している。

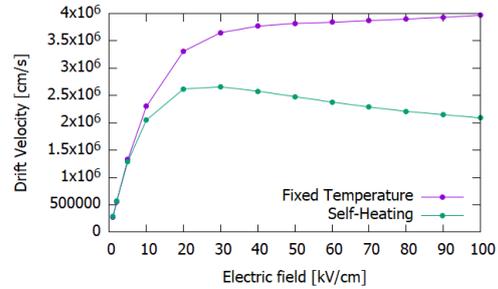


図 3. 熱の影響の有無によるドリフト速度の電場依存性

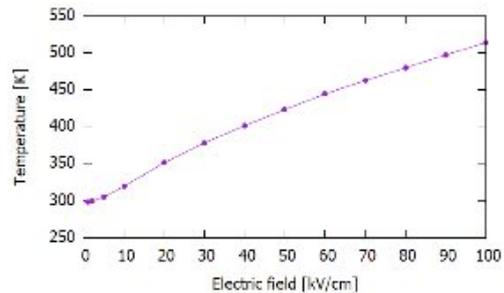


図 4. 自己無撞着に求めた温度の電場依存性

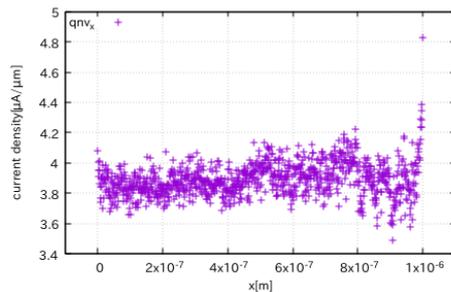


図 5. チャンネル領域での電流密度の位置依存性

(3) 理想的 2 次元系のモンテカルロ・シミュレータに簡易なデバイス構造を組み込むために、ソースおよびドレインを理想的な熱浴と仮定することで、チャンネル領域に熱平衡分布の電子が拡散によって注入されることを仮定して、チャンネル領域での電子輸送を模擬的にシミュレーションした。チャンネル内のポテンシャル形状はポアソン方程式を解くことで求めた。図 5 にチャンネル領域内での電流密度の位置依存性を示す。チャンネル領域の全体に渡ってほぼ一定の電流密度が得られており、定常状態を再現できていると考えられ

る。しかしながら、電流値が大きくバラついており、シミュレーションが安定動作しているとは言えない。これは、チャンネル内の電子数が少なく、ポテンシャルに大きなゆらぎが生じていることによる。後述するように、クーロン相互作用をより高精度に導入した、さらに精緻なモンテカルロ・シミュレーションが不可避であることが判明した。

(4) 上述の簡便なシミュレーションでは、クーロン相互作用を精緻に導入することが困難であり、また単原子層に有限の厚みを持たせることがポアソン方程式と結合するうえで重要になることから、当該グループで構築したモンテカルロ・シミュレータ（立体型デバイス構造）を拡張して、単原子層半導体が扱えるようにした。このシミュレータでは、クーロン相互作用を高精度に考慮することが可能である。一般には単原子層チャンネルは厚みのない理想的な2次元系が想定されているが、デバイス全域にわたる現実的なポテンシャル形状や絶縁膜を非対称に用いることで実現する高移動度等を説明するうえで、単原子層の有限の厚さを考慮することが本質的に重要である可能性を見出した。

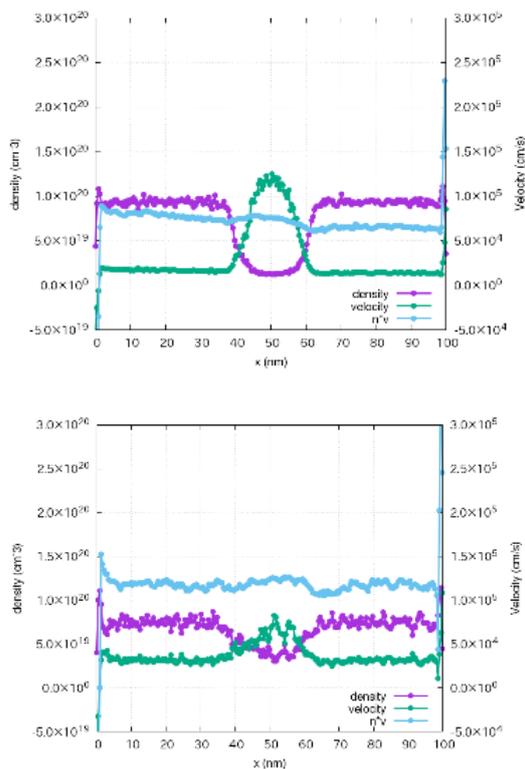


図6. チャンネル厚さが5nm（上図）および1nm（下図）でのデバイス全域における電子密度、ドリフト速度、電流密度の位置依存性

単原子層を想定したチャンネル領域に有限厚みをもたせた自己無撞着モンテカルロ・シミュレータの安定動作を確認したうえで、チャンネルの厚さを変数としてデバイス特性をシミュレーション解析した。図6にチャンネル領域の厚さを5 nmと1nmとした場合のデバ

イス全域における電子密度、ドリフト速度、電流密度を示す。厚さが5nmのときは、高濃度領域であるソースおよびドレインで電子密度は不純物密度と同程度で安定しており、電流密度もデバイス全域において一定となっている。これは、ソースおよびドレインまで含めた全域においてクーロン相互作用を安定にシミュレーションできていることを示している。一方、厚さが1nm以下になった場合、高濃度領域のポテンシャルが不安定となり、シミュレーションが正しく動作しないことが判明した。これは、電子自身のもつ電荷によるイメージ電荷の影響で、チャンネル内の電子の作るポテンシャルが正しく反映できていないことに起因している。従って、チャンネルの周りの絶縁膜および電極の環境を考慮した荷電粒子の作るポテンシャルのモデル化が不可避と考えられる。

➤ Drift-Diffusion equation (DD)

$$\frac{\partial n(\mathbf{r},t)}{\partial t} - \frac{1}{e} \nabla \cdot \mathbf{J}_n(\mathbf{r},t) = G_n(\mathbf{r},t) - R_n(\mathbf{r},t)$$

$$\text{coupled with } \mathbf{J}_n(\mathbf{r},t) = -en(\mathbf{r},t)\mu_n \left( -\frac{\partial \phi(\mathbf{r},t)}{\partial \mathbf{r}} \right) - eD_n \left( -\frac{\partial n(\mathbf{r},t)}{\partial \mathbf{r}} \right)$$

➤ self-consistent Hartree potential

the collective (drift) motion

➤ impurity density dependent mobility

resistive → random agitation

The potential under long wavelength limit from the Poisson equation.

➤ The Coulomb potential is split even in DD schema into the long-range and short-range parts: The screened Coulomb potential is taken into account through the conventional mobility model, while the log-range part is the one under the long wavelength limit (zero-Fourier component) obtained from the Poisson eq.

➤ The non-zero Fourier components except the singular (scattering) part?

図7. デバイス・シミュレーションの理論的枠組みにおけるクーロン相互作用の取り扱い

(5) 上記の結果を踏まえて、ナノ構造のもとの空間的に局在した離散不純物に伴ったポテンシャル変調のモデル化に関する理論的検討を行った。その結果、不純物を離散分布させることで生じる長さのスケールにおいて、ポアソン方程式で想定されている長さのスケールと輸送方程式で想定されている長さのスケールがデバイス・シミュレーションの理論的枠組みで不整合であることを見出した。具体的には、輸送方程式とポアソン方程式で想定されている長さのスケールを第一原理に基づいて検討したところ、輸送方程式では遮蔽効果が完璧であることを想定し、局所的なポテンシャルが平坦である（ゼロフーリエ成分のみ存在する）と仮定されていることが判明した（図7）。その結果、遮蔽が不完全な状態で動作するデバイスでは、本来消失している遮蔽のためのポテンシャル成分が揺らぎとして顕在化していることを明らかにした。この結果をもとに、当該者が前に提案した離散不純物モデルの物理的意味を明確にしたうえで、精度をさらに向上させた新たな離散不純物モデルを提案した。整合性の取れた離散不純物モデルを用いた場合の高濃度領域におけるポテンシャルゆらぎを図8に示す。高濃度であるにも関わらず、

わずかに存在するポテンシャルゆらぎは、ポアソン方程式を解くことで遮蔽から逃れた長距離のポテンシャル成分を表し、これがデバイス特性ばらつきの直接的原因となるポテンシャルゆらぎに相当する。遮蔽が完全な場合は、このポテンシャル成分は遮蔽によって完全に消失していることが仮定されており、そのような（遮蔽によって消失する）ポテンシャルを抽出することが局所的なポテンシャルゆらぎをデバイス・シミュレーションで正しく表現するためには必要となる。このような視点のもとで、非平衡グリーン関数法をはじめとした様々なデバイス・シミュレーションの理論的枠組みにおける物理的整合性を見直す必要があると考えられる。

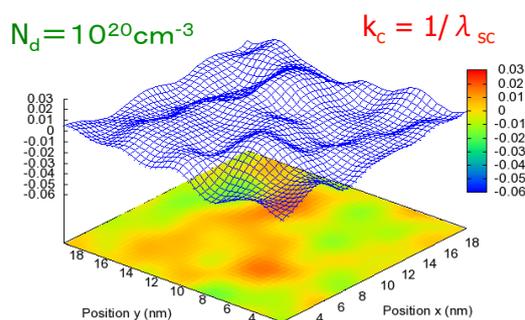


図 8. デバイス・シミュレーションで組み込まれるべき長距離のポテンシャル揺らぎ

## 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 7 件)

- ① S. Saito, M. Yoshiki, Shinya N., and N. Sano, "Determination of band profiles in GaN films using hard X-ray photoelectron spectroscopy", Jpn. J. Appl. Phys., 56, 021003 (5 pages) (2017). (査読有)  
DOI: 10.7567/JJAP.56.021003
- ② N. Sano, "Variability and Self-Average of Impurity-Limited Resistance in Quasi-One Dimensional Nanowires", Solid State Electron., 128, pp.25-30 (2017). (査読有)  
DOI: 10.1016/j.sse.2016.10.016
- ③ A. Suzuki, K. Yoshida, and N. Sano, "Self-Consistent Device Simulation of a-Si p-i-n Solar Cells and Energy Resolution Analyses of Capture and Emission Processes", J. Comp. Electron., 15 (4), pp.1554-1562 (2016). (査読有)  
DOI: 10.1007/s10825-016-0915-1
- ④ N. Sano and A. Ueda, "Phase Interference due to Multiple Impurities and Space-Average Resistance in Quasi-One Dimensional Nanowires", Appl. Phys. Exp., 9, 025001 (3 pages) (2016). (査読無)  
DOI: 10.7567/APEX.9.025001
- ⑤ N. Sano, "Impurity-limited resistance and phase interference of localized impurities under quasi-one dimensional nano-structures", J. Appl. Phys., 118, 244302 (16 pages) (2015). (査読有)  
DOI: 10.1063/1.4938392
- ⑥ A. Ueda, M. Luisier, and N. Sano, "Enhanced impurity-limited mobility in ultra-scaled Si nanowire junctionless field-effect transistors", Appl. Phys. Lett., 107, 253501 (4 pages) (2015). (査読有)  
DOI: 10.1063/1.4937901
- ⑦ K. Inuzuka, S. Honda, and N. Sano, "Conduction and Spin Transport via Edge States in Randomly Hydrogenated Graphene Nano-Ribbon", JPS Conf. Proc. 5, 011016 (6 pages) (2015). (査読有)  
DOI: 10.7566/JSPSC.5.011016

[学会発表] (計 20 件)

- ① (招待講演) 佐野伸行, “微細構造デバイスシミュレーションにおける局所的な乱れによるポテンシャルゆらぎの物理的側面,” 第 65 回応用物理学会春季学術講演会 シンポジウム「デバイスシミュレーション技術の活用と将来展望」(早稲田大学、東京、2018 年 3 月 17-20 日) .
- ② (依頼講演) 佐野伸行, “モンテカルロ・デバイスシミュレーションの基本的側面と応用”, 第 3 回 CDMSI (ポスト「京」重点課題 (7)) シンポジウム (東京大学物性研究所、柏、2017 年 12 月 5-6 日) .
- ③ (依頼講演) N. Sano, "Fundamental Aspects of Discrete Impurity Model for Nano-Scale Device Simulations," National Chiao Tung University "Seminar on Noise and Reliability in Silicon Electronics," NCTU, Hsinchu, Taiwan, November 13, 2017.
- ④ (招待講演) 佐野伸行, “不純物の離散性に伴った半導体デバイスモデリングの基本的側面 ~ランダム不純物ばらつきと自己平均化~, ” 電子情報通信学会 シリコン材料・デバイス(SDM)研究会集信学技術研究報告 (SDM2017-68) IEICE-117, no.290, pp.37-42 (機械振興会館、東京、2017 年 11 月 9-10 日) .
- ⑤ (招待講演) N. Sano, “Variability and Self-Average of Impurity-limited Resistance in Semiconductor Nanowires,” BIT’s 7th Annual World Congress of Nano Science & Technology-2017 (Nano S&T-2017), Fukuoka, Fukuoka, October 24-26, 2017.
- ⑥ (基調講演) N. Sano, “Physical Issues in Device Modeling: Length-Scale, Disorder, and Phase Interference,” 2017 International Conference on Simulation Semiconductor Processes and Devices (SISPAD2017), Kamakura, Kanagawa, September 7-9,

- 2017.
- ⑦ (招待講演) N. Sano, “Large Mobility Modulation Due to Discrete Impurities in Nanowires,” 230th Electrochemical Society Meeting (PRiME 2016/230th ECS Meeting), Honolulu, USA, October 2-7, 2016.
- ⑧ (依頼講演) 鎌倉良成, 藤田流星, 小長晃輔, 上岡良季, 小谷岳生, 森伸也, 鍾菁廣, 小田中紳二, 廣木彰, 佐野伸行, “フルバンドモンテカルロ法によるアバランシェ破壊解析”, 第2回 CDMSI (ポスト「京」重点課題(7)) シンポジウム(東京大学物性研究所、柏、2016年12月6-7日)。
- ⑨ (依頼講演) N. Sano, “Self-Consistent Monte-Carlo Simulations for Modern Electron Devices,” International Conference on Solid State Materials and Devices (SSDM-2016); Short Course A: Fundamental Physics for Modeling and Simulations toward Future Electron Devices, Tsukuba, September 26-29, 2016.
- ⑩ N. Sano, “Space-Average Impurity-Limited Resistance and Self-Averaging in Quasi-1D Nanowires,” 2016 Joint International EUROSIOI Workshop and International Conference on Ultimate Integration on Silicon (EUROSIOI-ULIS 2016), Vienna, Austria, January 25-27, 2016.
- ⑪ 坂本 萌, 六郷泰昭, 佐野伸行, “ダブルゲート構造における自己無撞着モンテカルロシミュレーション,” 電子情報通信学会 シリコン材料・デバイス(SDM)研究会集会 技術研究報告, pp. 61-64 (機械振興会館、東京、2016年11月10-11日)。
- ⑫ 鈴木 東, 吉田勝尚, 佐野伸行, “a-Si pin 太陽電池の自己無撞着シミュレーションとキャリアの捕獲生成過程の物理機構,” 電子情報通信学会 シリコン材料・デバイス(SDM)研究会集会 技術研究報告, pp. 61-64 (機械振興会館、東京、2016年11月10-11日)。
- ⑬ 佐々木敦也, 佐々木亮人, 片岡好則, 佐藤光, 平林英明, 齋藤秀一, 小林薫平, 高木茂行, 佐野伸行, “ドリフト拡散シミュレーションによる BaSi<sub>2</sub> 太陽電池の構造最適化”, 第63回応用物理学会春季学術講演会(朱鷺メッセ、新潟、2016年9月13-16日)。
- ⑭ 浅井栄大, 福田浩一, 服部淳一, 佐野伸行, “トンネル FET のデバイスシミュレーションに向けた 非均一電界型バンド間トンネルモデル”, 第63回応用物理学会春季学術講演会(朱鷺メッセ、新潟、2016年9月13-16日)。
- ⑮ (招待講演) N. Sano, “A New Departure in Graduate Honors Program at University of Tsukuba”, The Eleventh International

Nanotechnology Conference on Communication and Cooperation (INC 11), Hilton Fukuoka Sea Hawk, Fukuoka, May 11-13, 2015.

- ⑯ 井上和総, Min Chong Lim, 植田暁子, 佐野伸行, “ドリフト拡散シミュレーションにおけるキャリア移動度の離散不純物モデル依存性”, 秋季第76回応用物理学会秋季学術講演会(名古屋国際会議場、名古屋、2015年9月13-16日)。
- ⑰ 植田暁子, Mathieu Luisier, 佐野伸行, “ジャンクションレスナノワイヤ FET における移動度”, 秋季第76回応用物理学会秋季学術講演会(名古屋国際会議場、名古屋、2015年9月13-16日)。
- ⑱ 吉田勝尚, 岡田至崇, 佐野伸行, “量子ドット中間バンド型太陽電池における連続トンネルの影響”, 秋季第76回応用物理学会秋季学術講演会(名古屋国際会議場、名古屋、2015年9月13-16日)。
- ⑲ 金野有治, 植田暁子, 佐野伸行, “ナノワイヤ構造におけるイオン化不純物散乱: 結合定数と位相干渉”, 秋季第76回応用物理学会秋季学術講演会(名古屋国際会議場、名古屋、2015年9月13-16日)。
- ⑳ M. Restu Zulhidzal, Y. Kaneno, A. Ueda, S. Honda, K. Yoshida, N. Sano, “Effect of Impurity Correlation on Electron Transport under Nano-Device Structures”, 第62回応用物理学会春季学術講演会(東海大学、平塚市、2015年3月11-14日)。

[その他]

ホームページ

<http://www.bk.tsukuba.ac.jp/~dev-phys>

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

佐野 伸行 (SANO, Nobuyuki)

筑波大学・数理物質系・教授

研究者番号: 90282334