

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 27 年 9 月 24 日現在

機関番号：14501

研究種目：挑戦的萌芽研究

研究期間：2012～2014

課題番号：24656235

研究課題名(和文)大規模原子論的計算に基づくナノ構造デバイスシミュレータの開発

研究課題名(英文)Development of a Device Simulator Based on an Atomistic Large Scale Calculation

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) 3,100,000円

研究成果の概要(和文):【超並列化BPSM解法ルーチンの作成】原子軌道の多項式線形結合を基底とした展開法で、Legendre多項式展開によるGauss求積型の近似展開によるBPSMを並列化することによりオーダーN法を実現し、精度を2倍にする解法ルーチンを構築した。

【超並列化 Arnoldi/Jacobi-Davidson型固有値問題解法ルーチンの作成】DGMOSFETやFINFETなど量子閉じ込めが強い場合には、さらに、閉じ込めモードを利用し、取り扱うことの出来る原子数を10000×10000次元まで拡張することが出来、25nm以上のサイズを持つデバイスの電子状態解析および輸送特性解析が可能な解法ルーチンを構築した。

研究成果の概要(英文):[Implementation of a Super-Parallelized BPSM Routine] An order-N simulation method has been established using an expansion method based on a polynomial linear combination of atomic orbitals. In this method Legendre-polynomial, Chevyshev and/or Laguerre-polynomial expansion has been used to parallelize Gaussian quadrature which results in an order-N simulation twice as accurate as conventional method.

[Realization of a Super-Parallelized Arnoldi/Jacobi-Davidson Eigenvalue Solver]To analyze quantum transport phenomena in such as a DGMOSFET or a FINFET, where quantum confinement is much stronger than in conventional structures, a mode expansion method in the confined structures is found to be utilized effectively in the simulation. To make most of the property, an simulation method has been achieved to analyze larger device size with more than 25 nm in which the matrix size is as large as 10000x10000.

研究分野：計算ナノエレクトロニクス

キーワード：ナノデバイス 並列化固有値解析 原子軌道展開 非平衡グリーン関数法 ガウス求積法 Jacobi-Davidson法 第一原理計算 多項式線形結合法

1. 研究開始当初の背景

シリコン MOS 型トランジスタでは、キャリアが量子力学的な効果で Si-SiO₂ 界面から数ナノメートル(nm)離れた位置にずれていることは数十年前から明らかになっていたが、μm オーダのデバイスサイズではほとんど問題にならなかった。しかし、スケール則に基づくデバイスの微細化に伴って nm スケールのデバイスが作成されるようになり、この影響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。また、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量子力学的効果が存在することや、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(DGMOS, FIN 構造, ナノワイヤ構造)や新材料(III-V 族半導体チャネル等)を用いたデバイスが提案・検討されている。一方、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 (TAT) を増加させ、半導体産業の体力を奪う要因となっており、有効なシミュレーションによる TAT の軽減が喫緊の課題となっている。

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半導体デバイス、主としてシリコンナノワイヤトランジスタ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。(現在までに、非平衡 Green 関数法 (NEGF 法) に基づく 1 次元~3 次元のフォノン散乱現象を考慮したプロトタイプナノデバイスシミュレータ (**KOSMOS: Kobe University Simulator for Material of Science**) が実現できている。)

3. 研究の方法

プロトタイプの量子デバイスシミュレータに対して大規模原子論的なシミュレーション部分を付け加えるため、第一原理計算に基づく材料原子の特性の反映、離散変数表現による最良基底展開を用いた計算の高速化と、BPSM 基底関数展開を用いた高速化・軽快化アルゴリズムの開発、並列 Green 関数 Solver

の開発を行う。結晶の面方位、種々の散乱機構を含むマルチフィジクスの取り扱いと新構造のモデル化等の項目を研究計画線表(上図)に従って順次開発し、適宜時期に応じて Web にて公開する予定である。

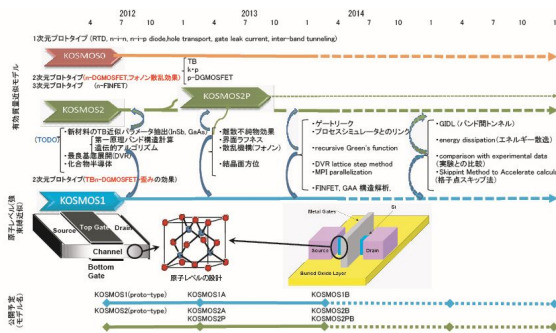
材料原子の特性を反映した原子論的シミュレーションプログラムの開発

現在のプロトタイプシミュレータをシリコンと化合物半導体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、最近接相互作用の範囲内で、ダイヤモンド、閃亜鉛鉱構造、六方晶系の結晶系に対する強結合 (TB) 近似ハミルトニアンを第一原理密度汎関数法によるバンド構造計算結果をパラメータ化する手法(変分法に基づくアルゴリズム:VA)により生成し、InSb, GaAs, SiGe 等、現在シリコン系デバイスに複合材料として導入され始めている半導体結晶の電子状態の解析に使うことができる強束縛近似パラメータの抽出を行う。この際の原子軌道の基底は s, p, d 軌道、および s 軌道を考慮する (KOSMOS1 内に一部組込済)。本研究での成果を利用して現在のシリコン系材料に対する原子論的な TB-NEGF 法を、より複雑な半導体材料複合系の特性の反映を行った解析を可能とする手法として発展させる。

第一原理密度汎関数法によるバルク結晶のバンド構造解析や構造安定化を行うことは現有の Intel Xeon CPU(2.6GHz)を持つ 16 並列の Workstation にて容易であるが、VA 法によるパラメータ抽出は、化合物系で 1 週間を要する。また、酸化物、特に遷移金属を有する High-K 材料では、取り扱う原子が重いので、パラメータ抽出に 2~3 週間の CPU 時間を要している。

最良基底展開を用いたシミュレータ高速化

プロトタイプシミュレータでは数値計算に有限差分法(FDM:Finite Difference Method)を用いてきたが、たとえ高次の近接点を用いてもデバイス内のエネルギー固有値や電位計算の計算精度をあげることは困難である。これに対して新たに開発した BPSM(Bridge Function Pseudo Spectral)法を用いると、FDM の半分の節点数に対して同じ精度を得ることができることが現在分かっている (Y. Saito, " Bridge-Function Pseudospectral Method for Quantum Mechanical Simulation of Nano-Scaled Devices, " pp.311-314, Proc. of SISPAD 2011)。ナノデバイスの特性計算にはエネルギー固有値、電位分布の繰り返し収束計算が必要で、かつ高い精度が要求されるため、たとえ有効質量近似でも FDM を用いている限りは計算精度、収束性ともに BPSM に及ばないことも明らかになっている。TB 近似で原子軌道関数を用いた場合、有効質量近



似に比べ大きなデバイスサイズ(> 45 nm)では計算時間の面で困難であったが、BPSM 法に基づいた原子軌道の多項式線形結合を基底とした展開法により Workstation レベルで動作するシミュレータの高速化、軽快化を図ることが理論的に可能である。

超並列化 BPSM 解法ルーチンの作成

原子軌道の多項式線形結合を基底とした展開法で、Legendre 多項式、Chebyshev 多項式、Laguerre 多項式展開による Gauss 求積型の近似展開による BPSM を並列化することによりオーダ $N/2$ 法を実現し、精度を 2 倍、必要な行列の非零要素数を従来の $1/4$ 以下に軽減する解法ルーチンを構築する。

超並列化 Arnoldi / Jacobi-Davidson 型固有値問題解法ルーチンの作成

DGMOS や FINFET など閉じ込めが強い場合にはさらに、閉じ込めモードを用いることで計算負荷を減らすことが可能であり、現在 5000×5000 次元 (s, p, s^* 原子軌道を持つ 1000 個の原子) を取り扱うことが可能であるが、固有値計算を並列化することにより取り扱える次数 (原子数) を一桁増大し 45nm 以上のサイズを持つデバイスの電子状態解析および輸送特性の解析が可能な解法ルーチンを構築する。

超並列高速化グリーン関数ソルバーの作成

BPSM と固有値問題解法を複合し、強束縛近似モデルによる実空間対角表現とモード対角表現の行列表現のうち疎になる表現を自動的に選定するルーチンの開発により、グリーン関数を高速に解くことの出来るアルゴリズムを構築する。

グラフィカル・ユーザインタフェース (GUI) プロトタイプの構築

結果の視覚化には国内で広く用いられるために GNUplot および GNU Octave により現在のプログラムを書き直し、クライアント・サーバ型インタフェースによる構成に変更する。TB 材料データベースとしては SQL 言語を用いたデータベースを構築する。

4. 研究成果

超並列化 BPSM 解法ルーチンの作成

原子軌道の多項式線形結合を基底とした展開法で、Legendre 多項式、Chebyshev 多項式、Laguerre 多項式展開による Gauss 求積型の近似展開による BPSM を並列化することによりオーダ N 法を実現し、従来の方法に比べて精度を 2 倍、必要な行列の非零要素数を 4 分の

1 以下に軽減する解法ルーチンを構築することが出来た。

超並列化 Arnoldi / Jacobi-Davidson 型固有値問題解法ルーチンの作成

DGMOSFET や FINFET など量子閉じ込めが強い場合には、さらに、閉じ込めモードを利用することで計算負荷を軽減することが可能であり、固有値計算を並列化することにより取り扱える次数、換言すれば、取り扱うことの出来る原子数を 10000×10000 次元まで拡張することが出来、25nm 以上のサイズを持つデバイスの電子状態解析および輸送特性解析が可能な解法ルーチンを構築できた。

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 10 件: **すべて査読あり**)

A. Mehdipour, K. Sasaoka, M. Ogawa, and S. Souma, Strain-induced modulation of anisotropic photoconductivity in graphene, Jpn. J. Appl. Phys., Vol. 53, 115103 (2014).

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, No. 17 pp. 20140548, (2014).

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, 213505 (2014)

S. Souma and M. Ogawa, Pure spin current induced by adiabatic quantum pumping in zigzag-edged graphene nanoribbons, Appl. Phys. Lett., Vol. 104, 183103 1-4 (2014).

Shunsuke Koba, Masaki Ohmori, Yosuke Maegawa, Hideaki Tsuchiya, Yoshinari Kamakura, Nobuya Mori, M. Ogawa, Channel length scaling limits of III-V channel MOSFETs governed by source-drain direct tunneling Japanese Journal of Applied Physics, Vol. 53, p. 04EC10 (2014)

Shiro Kaneko, Hideaki Tsuchiya, Yoshinari Kamakura, Nobuya Mori, M. Ogawa, Theoretical performance estimation of silicene, germanene, and graphene nanoribbon field effect

transistors under ballistic transport Applied Physics Express, Vol. 7, p.35102 (2014)
Ryutaro Sako, Naomi Hasegawa, Hideaki Tsuchiya, M. Ogawa, Computational study on band structure engineering using graphene nanomeshes Journal of Applied Physics, Vol.113, p. 143702 (2013)
Shunsuke Koba, Yosuke Maegawa, Masaki Ohmori, Hideaki Tsuchiya, Yoshinari Kamakura, Nobuya Mori, M. Ogawa, Increased subthreshold current due to sourcedrain direct tunneling in ultrashort-channel III-V metal-oxide-semiconductor field-effect transistors, Applied Physics Express, Vol. 6, p.64301 (2013)
S. Souma, OHMI Yusuke, M. Ogawa, Effect of lateral strain on gate induced control of electrical conduction in single layer graphene device Journal of Computational Electronics, Vol. 12, No. 2, pp. 170-174(2013)
Shunsuke Koba, Ryoma Ishida, Yuko Kubota, Hideaki Tsuchiya, Yoshinari Kamakura, Nobuya Mori, M. Ogawa, The impact of increased deformation potential at MOS interface on quasi-ballistic transport in ultrathin channel MOSFETs scaled down to sub-10nm channel length, Technical Digest of Int. Electron Devices Meeting (IEDM2013), pp.312-315 (2013)

[学会発表](計 35 件)

Yuki Furubayashi, Matsuto Ogawa, Satofumi 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 (SISPAD, Yokohama), pp. 201-204 (2014).
Amir Mehdipour, Kenji Sasaoka, Matsuto Ogawa, and Satofumi Souma Photoconductivity-based strain sensing in graphene, International Symposium on Recent Progress of Photonic Devices and Materials, Nov. 13-14, 2014 (Kobe), Japan
Yuki Furubayashi, Matsuto Ogawa, Satofumi Souma, Numerical simulation of current noise caused by potential fluctuation in nanowire FET with an oxide trap, 2014 International Conference on Simulation of Semiconductor Processes

and Devices (SISPAD2014) September 9-11, 2014, Mielparque Yokohama, Yokohama, Japan
Ryoma Ishida, Shunsuke Koba, Hideaki Tsuchiya, Yoshinari Kamakura, Nobuya Mori, Shigeyasu Uno, Matsuto Ogawa, Extraction of Quasi-Ballistic Transport Parameters in Si Double-Gate MOSFETs Based on Monte Carlo Method 2014 International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices 2014/09/09-11, Mielparque Yokohama, Yokohama, Japan

[図書](計 0 件)

[産業財産権]
出願状況(計 0 件)

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
出願年月日：
国内外の別：

取得状況(計 0 件)

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
出願年月日：
取得年月日：
国内外の別：

[その他]ホームページ等
http://www2.kobe-u.ac.jp/~ler12/en_research.html

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

()

研究者番号：

(3) 連携研究者

()

研究者番号：