

### 流体モデルデバイスシミュレータへのモンテカルロ法導入の一考察

Dang, Ryo / Hirano, Yasuhik / 平野, 康彦 / 檀, 良

---

(出版者 / Publisher)

法政大学工学部

(雑誌名 / Journal or Publication Title)

法政大学工学部研究集報 / 法政大学工学部研究集報

(巻 / Volume)

28

(開始ページ / Start Page)

157

(終了ページ / End Page)

167

(発行年 / Year)

1992-02

(URL)

<https://doi.org/10.15002/00003877>

# 流体モデルデバイスシミュレータへの モンテカルロ法導入の一考察

檀 良\*・平野康彦\*\*

## On the Inclusion of A Monte Carlo Routine for Carrier Mobility into A Fluid Model Device Simulator

Ryo DANG\*and Yasuhiko HIRANO\*\*

### ABSTRACT

In the simulation of a semiconductor device, one of the key problems is how to secure an accurate model for the carrier mobility. Theoretically, this latter can be obtained from a solution of the Boltzmann transport equation which, however, is difficult to be solved straightforwardly. In the present paper, we describe an attempt to solve the Boltzmann equation using a Monte Carlo method. The Monte Carlo routine for the carrier mobility is then merged with a drift-diffusion device simulator. Results obtained from this merged system as compared with a conventional system using an empirical mobility model, show that our method is promising in dealing with a miniaturized device, especially one with a deep-submicron channel length.

### 1. はじめに

近年の半導体製造技術の向上により、集積回路内に搭載される素子寸法はサブミクロン領域に至っている。このような微細素子のシミュレーションにおいては、キャリアが高電界で加速され、さらに短い領域を走行するため、散乱体が少なくなり、従来から用いられてきているキャリアを流れとして取り扱う流体モデル（ドリフト・拡散モデル）の妥当性が失われてくる<sup>〔1〕</sup>。この理由として考えられることに、流体モデルが前提としている移動度モデル<sup>〔2〕</sup>の精度の信頼性がある。このような微細半導体の電気伝導を考えるためには、流体モデルで用いているポアソン方程式、

---

\*電気工学科電気電子専攻

\*\*工学研究科電気工学専攻

電子・正孔電流連続方程式<sup>[3]</sup>より、さらに基本的なボルツマン輸送方程式に立ち戻る必要がある。しかし、ボルツマン輸送方程式は時間、位置ベクトル、波数ベクトルの7個の変数を持つ偏微分方程式であり、現実の系において解くことはかなり困難である。

ところで、次元数が多く直接解法が困難な場合に従来よく用いられる手法にモンテカルロ法がある。モンテカルロ法は、問題の確率的現象を乱数を用いて取り扱い、それに統計操作を加えて解を求める計算手法である。半導体デバイスシミュレーションにおいては、デバイス内を走行するキャリアを粒子に見立てる粒子モデルを用い、個々の粒子を方程式によって記述される環境の中で運動させ、その時間・集合平均を取ることによって解を得ようとする<sup>[4]</sup>。このような操作によって間接的にボルツマン輸送方程式を解いたことになり、デバイス内のキャリアの振る舞いを明らかにできる。モンテカルロ法をデバイスシミュレーションに適用する場合、大きく分けて1粒子系と多粒子系がある。一般に1粒子系のモンテカルロ法は1個のキャリアに注目し、そのキャリアのドリフト速度、移動度、拡散定数、平均エネルギー等のデバイスパラメータの算出に用いられる。多粒子系では解析対象内部にキャリアを分布し、その分布による電界でキャリアを運動させてデバイスの電流レベルの解析ができる。一般にモンテカルロ法を用いたデバイス解析では、その現象のミクロな機構が明らかな場合は、かなりの精度が期待できる。

一方、MOSFETの反転層における現象については現在研究が盛んに行われている。そして、この領域での移動度モデルの問題は重要であり、従来から用いられている山口モデル<sup>[2]</sup>の限界が生じてきている。この理由の一つに、反転層内ではキャリアが狭い領域に閉じこめられ、酸化膜界面に対して垂直方向の運動を制限され、2次元的な運動を行うと考えられるからである。このような効果はモンテカルロ法ではサブバンド間の散乱という形で表現でき、反転層内の移動度を算出できる<sup>[5]</sup>。

以上のような背景をもとに、本来であればモンテカルロ法によって算出した反転層移動度を流体モデルデバイスシミュレータに導入すべきであるが、本稿ではその第一段階として、従来反転層にかかるような高電界は印加せず、山口モデルが信頼性を保つ低電界領域でモンテカルロ法によるバルクの移動度を導入した場合をシミュレーションし、本手法の有効性の検討を行う。

## 2. モンテカルロデバイスシミュレーション

デバイスシミュレーションにおけるモンテカルロ法は、初めは電子の輸送現象の解析に用いられた<sup>[6]</sup>。つまり、運動量空間での電子の運動を追跡し、電界に対する電子の速度などが求められた。次に、粒子の分布による局所的な電界による効果を含めた解析が行われ、具体的にデバイスへの応用が進められた<sup>[7]</sup>。

一般に多粒子系のモンテカルロデバイスシミュレーションでは、キャリアである粒子を分布させ、それによる電界を計算し、その電界でキャリアを運動させ、再びその分布より電界を計算し

直すという手順を繰り返すことでデバイスの特性を解析する。また、解析対象材料の電子の平均速度、平均エネルギー、分布関数等は、1個のキャリアに注目しこれの運動を追跡することで得ることができる。以下には、定常状態に対する1粒子シミュレータの概要を示す。

### 2.1 電子の運動方程式

ブロッホの定理より、波数ベクトル $k$ で指定されるブロッホ状態 $\phi_k(r)$ に対する電子速度 $v$ は量子力学的平均操作により、次のようになる。

$$v = \frac{1}{\hbar} \text{grad} E \tag{2.1.1}$$

ここで、 $\hbar$ はプランクの定数、 $E$ は電子のエネルギーである。

電子に電界 $F$ が作用している時、電子の状態は時間とともに変化する。その状態の変化は以下のようになる。

$$\hbar \frac{d k}{d t} = q F \tag{2.1.2}$$

ここで、 $q$ は電子の電荷である。

### 2.2 エネルギーバンド構造

式(2.1.1)の電子のエネルギー $E$ は材料のエネルギーバンド構造から決まる。通常は、Fig2.2.1でキャリア電子が存在する最低伝導帯バンドのエネルギー極小値が、 $k$ 空間上の $\langle 000 \rangle$ 、 $\langle 100 \rangle$ 、 $\langle 111 \rangle$ に存在するエネルギーバンド構造を用いる<sup>[4]</sup>。エネルギーが低いほど電子が存在しやすい

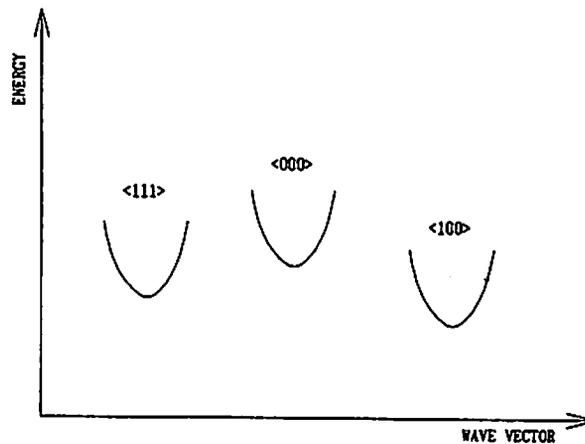


Fig.2.2.1 エネルギーバンド構造

め、この3点に電子が集中すると考えられる。波数ベクトル $k$ と電子のエネルギーを表す関係式はいくつかあるが、一般には $k$ の2次関数を用いた放物線バンド構造を使っている。等エネルギー面が球形のバンド構造は次の式で表される。

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = E \quad (2.2.1)$$

ここで $m^*$ は電子の有効質量である。この場合の $E$ 、 $k$ はそれぞれバレーの底からのエネルギー、バレーの中心から計られた波数ベクトルを用いている。回転楕円体等のエネルギー面をもつ場合の電子エネルギーは次のようになる。

$$\frac{\hbar^2}{2} \left( \frac{k_x^2}{m_x^*} + \frac{k_y^2}{m_y^*} + \frac{k_z^2}{m_z^*} \right) = E \quad (2.2.2)$$

$k_x$ 、 $k_y$ 、 $k_z$ 及び $m_x^*$ 、 $m_y^*$ 、 $m_z^*$ はそれぞれ直交座標系のベクトルと有効質量の3つの成分である。

さらに、伝導帯の底から離れた領域では、波数ベクトルと電子のエネルギーの分散関係の放物線性が消え、非放物的な分散関係が各バレーの間で成立する。この場合のエネルギーと波数の関係は次のように書くことができる。

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = E (1 + \alpha E) \quad (2.2.3)$$

ここで、 $\alpha$ は非放物性度である。

### 2.3 自由飛行

添え字  $i$  で表される各種散乱過程の和を取った全散乱確率 $\lambda(k)$ を次のようにする。

$$\lambda(k) = \sum_i \lambda_i(k) \quad (2.3.1)$$

時刻 $t=0$ から時刻 $t=t'$ まで自由飛行し得る確率を $S(t')$ とすると $S(t'+\Delta t)$ は、

$$S(t'+\Delta t) = S(t') \{1 - \lambda(k(t')) \Delta t\} \quad (2.3.2)$$

であり、式(2.3.2)左辺のテーラー展開により、

$$\frac{dS(t')}{dt'} = -\lambda(t)S(t') \quad (2.3.3)$$

となり、この微分方程式の解は、

$$S(t') = C \cdot \exp\left\{-\int_0^{t'} \lambda[k(t)] dt\right\} \quad (2.3.4)$$

で表され、これは時刻  $t = 0$  で散乱終了後、時刻  $t'$  まで自由飛行し得る確率を示している。これにより、時刻  $t'$  まで自由飛行を続けてから散乱されるまでの単位時間あたりの散乱確率  $P(t')$  は、時刻  $t'$  での単位時間あたりの散乱確率  $\lambda[k(t')]$  と  $S(t')$  の積で表され、それは次のようになる。

$$P(t') = \lambda[k(t')] \exp\left\{-\int_0^{t'} \lambda[k(t)] dt\right\} \quad (2.3.5)$$

式(2.3.5)から得られる  $P(t')$  と一様乱数  $r (0 < r < 1)$  を用いて、自由飛行時間  $\tau$  は次のように求められる。

$$\begin{aligned} r &= \int_0^{\tau} P(t') dt' \\ &= 1 - \exp\left\{-\int_0^{\tau} \lambda[k(t)] dt\right\} \end{aligned} \quad (2.3.6)$$

よって、自由飛行時間  $\tau$  は乱数  $r$  を発生された後、式(2.3.6)を積分することで得られる。

しかし、このような方法では自由飛行時間  $\tau$  を求めるとすると、被積分関数  $\lambda[k(t)]$  が各粒子により異なる波数  $k$  の履歴を持っているために  $\tau$  の算出にかかる計算時間はかなりのものとなる。そこで、これに代わる方法として仮想散乱<sup>(8)</sup> という概念を導入する。ランダムに選択した散乱過程が物理的な散乱メカニズムの一つに相当しない場合はこの仮想散乱を選択し、実際には自由飛行を続行させる。この方法を使うと、式(2.3.5)の全散乱確率  $P(t')$  は次のようになる。

$$P(t') = \lambda(E) \exp(-\Gamma t') \quad (2.3.7)$$

ここで  $\Gamma$  は仮想散乱を導入した場合の総散乱確率である。よって、自由飛行時間  $\tau$  は式(2.3.6)より、

$$r = 1 - \exp(-\Gamma \tau) \quad (2.3.8)$$

となり、式(2.3.8)を変形すると次の式を得る。

$$\tau = -\frac{1}{\Gamma} \ln(1-r) \quad (2.3.9)$$

これは、式(2.3.6)に比べて非常に簡単なものとなる。

#### 2.4 自由飛行後の状態

乱数 $r$ により導出された十分短い時間である自由飛行時間 $\tau$ の間、1粒子モンテカルロシミュレーションでは、電界 $F$ は一定として式(2.1.1)、式(2.1.2)を積分してキャリアの運動を行う。

$$r(t) = r_0 + \int_0^t \frac{1}{\hbar} \text{grad}(E) dt \quad (2.4.1)$$

$$k(t) = k_0 + \frac{q}{\hbar} F t \quad (2.4.2)$$

したがって、自由飛行後の粒子の位置、波数ベクトルは式(2.4.1)、式(2.4.2)により求めることができる。

#### 2.5 散乱メカニズムの選択

$\lambda_i(E)$ をエネルギー $E$ の粒子が単位時間に $i$ 番目の散乱を受ける割合とすると、この散乱を受ける確率は $\lambda_i/\Gamma$ である。よって、乱数 $r$ を用い、次式を満たす $i$ を求めることで粒子が受ける散乱を統計的に定めることができる。

$$\sum_{i=0}^{n-1} \lambda_i(E) \leq r \cdot \Gamma \leq \sum_{i=0}^n \lambda_i(E) \quad (2.5.1)$$

また、

$$\sum_{i=0}^n \lambda_i(E) \leq r \cdot \Gamma \quad (2.5.2)$$

のときは、仮想散乱を選択したことになり、実際には散乱を受けずに自由飛行を行う。

### 2.6 散乱後の状態

粒子が受ける散乱の種類が決まると散乱後の状態は、再び乱数を用いることで計算することができる。散乱前の状態 $k$ から散乱後の状態 $k'$ への単位時間あたりの散乱の割合を $S_j(k, k')$ とすると、 $j$ の散乱を経て状態を変える割合 $\lambda_j$ は、

$$\begin{aligned} \lambda_j &= \int d^3 k' S_j(k, k') \\ &= \int k'^2 dk' d\cos\theta d\phi S_j(\theta, \phi) \end{aligned} \tag{2.6.1}$$

となる。ここで、 $\theta$ は $k$ と $k'$ のなす角、 $\phi$ は方位角である。一般に $\phi$ は一様であるとみなすことができ、

$$\phi = 2\pi r_\phi \tag{2.6.2}$$

により求められる。 $\theta$ は各散乱過程で決定される角度分布を $P_j(\theta)$ とする時、次式によって決定される。

$$r_\theta = \frac{\int_0^\theta d\cos\theta' \int_0^{2\pi} S_j(\theta', \phi) d\phi}{\int_0^\pi d\cos\theta' \int_0^{2\pi} S_j(\theta', \phi) d\phi} \tag{2.6.3}$$

以上の計算手法を繰り返すことにより、キャリア輸送の特性を求めることができる。この計算手法のフローをFig 2.6.1に示す。

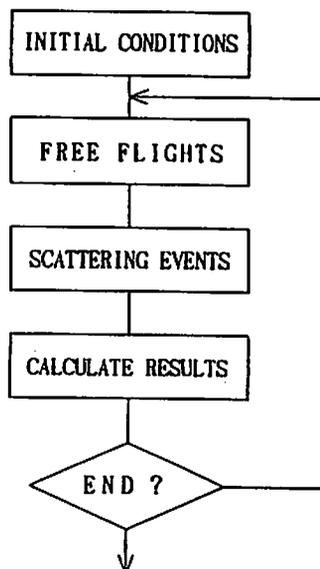


Fig. 2.6.1 1粒子系モンテカルロ法の計算フロー

### 3. 計算方法

今回は、実効チャンネル長 $0.6[\mu\text{m}]$ 、チャンネル幅 $2[\mu\text{m}]$ 、酸化膜厚 $20[\text{nm}]$ 、ソース・ドレイン拡散深さ $0.2[\mu\text{m}]$ 、基板濃度 $5 \times 10^{16}[\text{cm}^{-3}]$ 、拡散層濃度 $1 \times 10^{20}[\text{cm}^{-3}]$ のMOSFETを解析対象として、モンテカルロ法は文献[4]のモデルに従い、先に示した1粒子モンテカルロ法によってデバイス内のキャリア移動度を求め、その値を従来のドリフト・拡散モデルに基づくデバイスシミュレータ<sup>[9]</sup>に導入し、その電流値を計算した。この計算フローをFig 3.1に示す。ここで、デバイス解析の主な計算ルーチンは流体モデルシミュレータを使用し、移動度計算時のみモンテカルロルーチンを使用して、その値を用いて解が収束するまで計算を行った。ただし、MOSFETでは電流は反転層中の狭い領域を集中して流れるという特性があり、シミュレーションにおいてはFig3.2に示すように酸化膜界面から垂直方向の1メッシュ目とそれ以降では電流で比較すると1メッシュ目に98.7%の電流が集中している。よって、モンテカルロ法による移動度の計算はこの1メッシュ目の領域のみを対象とする。

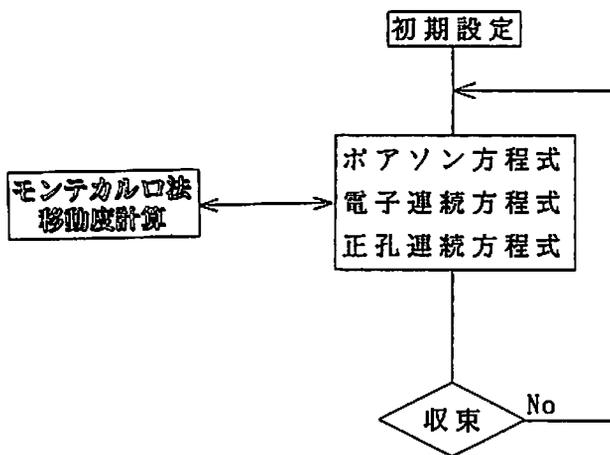


Fig.3.1 モンテカルロ法による移動度計算の導入概念

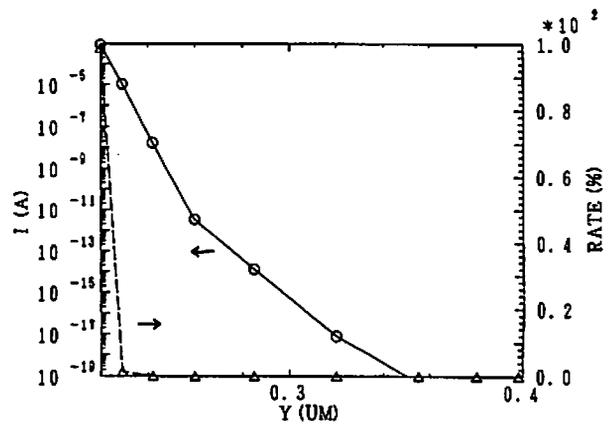


Fig.3.2 シミュレーションによるデバイス縦方向距離と電流  
実線：電流  
破線：比率

### 4. 計算結果

まず、モンテカルロシミュレータで求めた移動度と山口モデルの比較を示す。Fig 4.1は移動度対電界強度、Fig 4.2は移動度対不純物濃度である。図中の丸印はバルクシリコンの実測データである<sup>[10],[11]</sup>。どちらの場合も山口モデルによる移動度は実測値とよい一致をみている。モンテカルロ法による結果は電界強度については、良い結果を得ているが不純物濃度ではパラメータの変更の必要があるといえる。

Fig.4.1, 4.2, 4.3

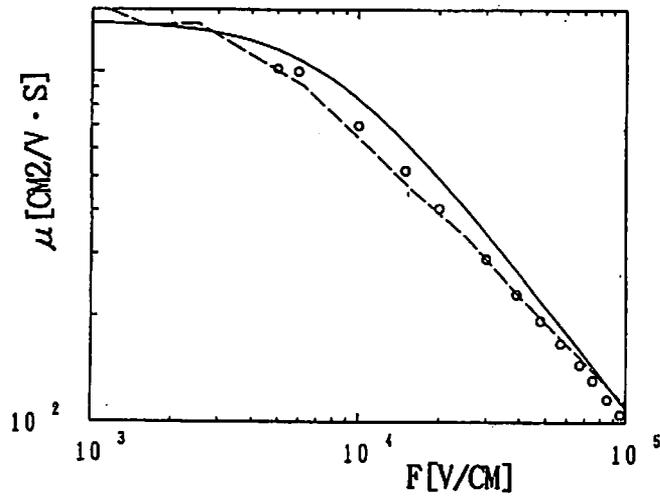


Fig.4.1 移動度対電界強度

実線：山口モデル  
 点線：モンテカルロ法  
 丸印：実測値

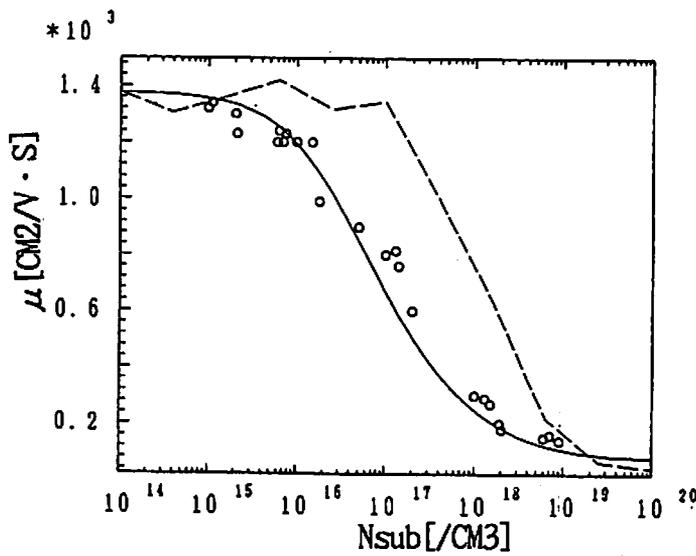


Fig.4.2 移動度対不純物濃度

実線：山口モデル  
 点線：モンテカルロ法  
 丸印：実測値

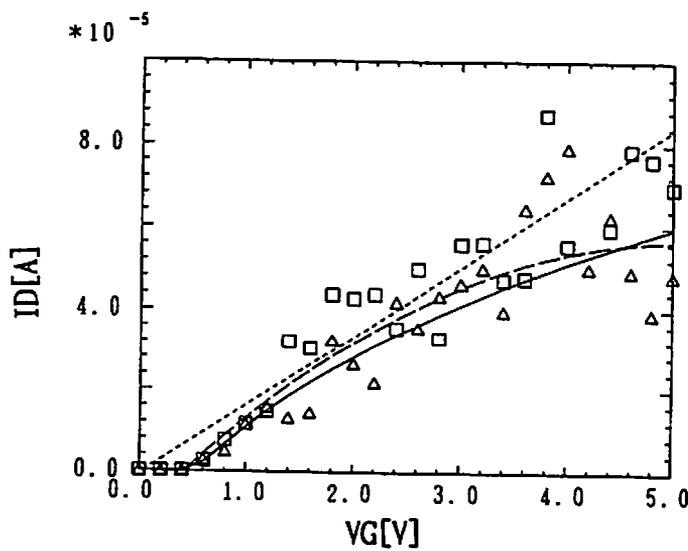


Fig.4.3 ドレイン電流・ゲート電圧特性

ドレイン電圧=0.1[V]  
 実線：山口モデル  
 △：モンテカルロ法  
 破線：△の最小自乗法による近似  
 □：モンテカルロ法 (計算時間2倍)  
 点線：□の最小自乗法による近似

Fig 4.3にモンテカルロ法によって求めた移動度を導入した場合と、山口モデルの場合の電流電圧特性について示した。両手法を比較してみると、モンテカルロ法による計算は電圧によるばらつきはあるものの、ほぼ山口モデルを用いた場合と変わりの無い結果である。また、モンテカルロ法での計算精度を変えてシミュレーションを行ったが、電流値を比較すると精度を上げた方がわずかに高い値を算出している。モンテカルロルーチン1回にかかる計算時間を比較した場合は約2倍の違いがあるが、最終的な電流値までの計算時間は約1.4倍となり、一概にモンテカルロ法の計算時間が最終的な計算時間を支配しているとは言えない。これは、モンテカルロ法による移動度のばらつき具合とその値を用いた流体モデルの計算ルーチンの反復回数の兼ね合いが原因と考えられる。

## 5. 終わりに

我々はデバイスシミュレーションにおけるMOSFET反転層内移動度の問題解決のため、従来の流体モデルとモンテカルロ法による移動度を組み合わせて計算する手法の第一段階として、今回はバルクシリコン移動度をモンテカルロ法で計算してシミュレーションを行った。結果として得られた電流値は、山口モデルの結果と大きな差はなく、現段階では実測値とのモンテカルロ計算のフィッティング等の問題はあるものの、より精度の高い移動度を用いたデバイスシミュレーションを目指す上で、本手法は有効であるといえる。

## 謝 辞

本研究を行うにあたり、ご協力いただきました当研究室の林洋一氏に深く感謝します。

## 参考文献

- [1] J. R. Barker and D. K. Ferry, Solid-State Electronics, Vol.123, p.519, 1980.
- [2] Ken Yamaguchi, IEEE Trans. Electron Devices, Vol.ED-30, No.6, p.658, 1983.
- [3] H. K.Gummel, IEEE Trans. Electron Devices, Vol.ED-11, p.455, 1964.
- [4] C. Jacoboni and Reggiani, Rev. Mod. Phys., Vol.55, No.3, p.645, 1983.
- [5] 今永 俊治、早藤 貴範、 秋季応物、p.653, 28p-G-4, 1990.
- [6] W. Fawcett, A. D. Boardmann and S. Swain, J. Phys. Chem. Solids., Vol.31, p.1963, 1970.
- [7] R. W. Hockney, R. A. Warriner and M. Reiser, Electron. Lett., Vol.10, p.484, 1974.
- [8] H. D. Rees, J. Phys. Chem. Solids., Vol.30, p.643, 1969.

- [9] 林 洋一、檀 良、信学技報、SDM91-112, p.15, 1991.
- [10] P. M. Smith, M. Inoue, and J. Frey, Appl. Phys. Lett., Vol.37, No.9, p.797, 1980.
- [11] F. Mousty, P. Ostoja, and L. Passari, J. Appl. Phys., Vol.45, No.10, p.4576, 1974.