

数値計算による半導体物性解析手法について -量子力学の基礎-

清水 共*, 森 優策†, 内海 太禄‡

Analysis of Semiconductor Physics by use of Numerical Simulation - a Basic Problem of Quantum Mechanics -

Tomo SHIMIZU, Yusaku MORI, Taro UTSUMI

Abstract

This paper deals with a method of numerical simulation in consideration of a quantum effect at nano-devices. With the problem of the one dimensional infinite square well, a calculation method to evaluate the electron distribution is suggested. Schrödinger equation and Poisson equation in x-direction perpendicular to the well potential are analyzed. CLAPACK routines are used in the simulation.

Keywords: numerical simulation, Poisson equation, Schrödinger equation, difference method

1 はじめに

現在, 身の回りの生活空間にはたくさんの電子機器があふれている¹⁾。これらの電子機器はそのほとんどに半導体が組み込まれている。このように半導体産業は社会システムを支える重要な基幹産業である。半導体産業は, 1947年の点接触型トランジスタの実験に始まり, 真空管に変わる固体デバイスであるトランジスタが登場して, 1960年代にIC(Integrated Circuit)が開発されて多くの電子機器が世界中に普及した。

ICの発展は, 搭載するデバイス(トランジスタなどの素子)の加工寸法を小さくする「微細化」技術の進歩に対応する。デバイスの微細化は, 様々な恩恵を与える。ICの高性能化, 高集積化, 小型・軽

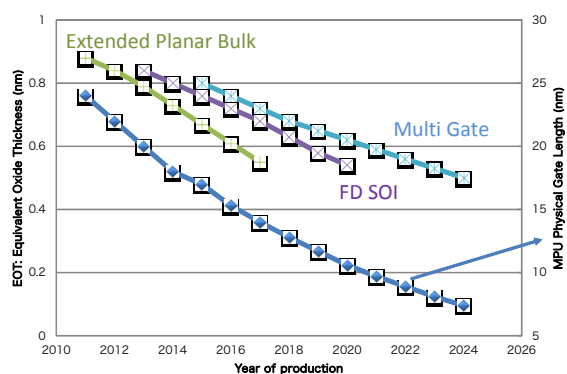


図 1: ITRS2011 による微細化トレンド (High-performance Logic Technology)

量・薄膜化, 低消費電力化, 低価格化, 信頼性向上など, 様々なメリットを与え半導体デバイスの中心的役割を担ってきた MOSFET を例にすると比例縮小則に従った単純なデバイス構造の微細化の追求が半導体産業の発展に直結した。

*香川高等専門学校詫間キャンパス 電子システム工学科

†香川高等専門学校専攻科 電子情報通信工学専攻

‡長岡技術科学大学 電気電子情報工学課程

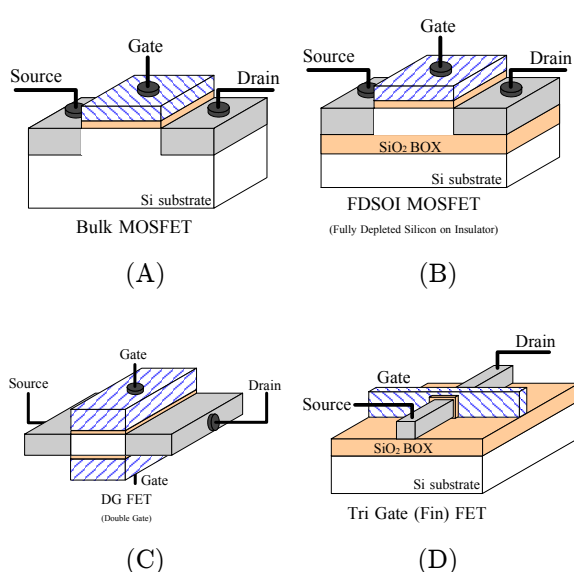


図 2: 電界効果型トランジスタの 3 次元構造の比較: (A)Bulk MOSFET, (B)FDSOI MOSFET, (C)DG FET, (D) Tri-Gate FET

図 1 は、ITRS2011 が公開している半導体デバイスの物理ゲート長とゲート酸化膜厚のトレンドである²⁾。前述したように、デバイスの微細化の結果としてデバイス寸法が nm オーダーへ突入し、近年、一般社会においても話題とされる”ナノテクノロジー”が半導体技術の主戦場となる。酸化膜厚に注目すれば、EOT(Equivalent Oxide Thickness)で 1nm 以下が主流となり、この厚さは原子数層分に対応する。これは、従来から行われているバルク結晶的な物性特性を利用したデバイス解析から、デバイス・結晶を構成する分子や原子の特性を考慮したデバイス解析の重要性と必要性が生じることに対応する。

また、EOT の薄膜化に代表されるように比例縮小則に従ったデバイスサイズの微細化は、従来の MOSFET 構造の物理的限界に直面し、多くの新しいデバイス構造が生み出されている。図 2 は、従来の半導体デバイスの代表格である MOSFET の 3 次元構造と、近年注目される電界効果型トランジスタである FDSOI MOSFET, DG FET, Tri-Gate FET の 3 次元構造を示している³⁾。図 (C) の Double Gate 構造に注目すれば、source-drain 間の電流路であるチャンネルが二つの gate によって挟まれ、デバイス構造の微細化により gate 方向に量子井戸が形成されチャンネルを形成する電子の閉じ込めが起こる。

新しいデバイス構造の登場やデバイスの微細化に

伴い、デバイス特性を解析するため利用される従来の比較的容易な解析式は不十分である。特に、デバイスの微細化に伴うキャリアすなわち電子の扱いが重要となる。電子の波動性を扱う量子力学的効果はとして重要なものに、干渉、トンネリング、エネルギーの量子化の三つの効果があげられる。

デバイス特性の解析方法の検討が必要である一方で、個人使用のパソコンの性能向上に伴い、一昔前のスーパーコンピュータ並の非常に高性能な数値計算環境が安価で入手可能である。これは、大きな研究所や大学に所属しなくても学生が非常に安価な手段で高度な数値計算環境を利用可能であることを意味する。電子の波動性を議論する上で重要な量子力学の基本方程式である波動方程式は、Schrödinger 方程式であり二次の偏微分方程式である。

本報告書では、極微細な半導体デバイスの特性解析において、極小領域に対する電子の取り扱い、すなわち、量子力学的効果の導入の重要性を鑑みて、その基礎となる 1 次元の井戸型ポテンシャル問題を数値計算により評価する。これは、図 2(C) で紹介した DG FET の gate 幅方向の電子閉じ込めを考慮したデバイスモデルを想定したデバイス特性解析の基礎となる。

2 数値計算ライブラリ導入

工学分野において、代数的な方法で解を得ることが困難な問題を数値を用いて近似的に解く手法がコンピュータ技術の発展によって注目されている。このような数値解析シミュレーションでは多次元行列演算や高速フーリエ変換等の数学的処理が必要不可欠である。これらの計算処理のアルゴリズムは確立された技術である。そのため、多数の計算ライブラリがさまざまな方法で提供されている。そこで、デバイス解析に利用する数値計算では、学生が個々に計算ライブラリを構築する事を比較的重要性の低い作業として割り切り、非常に高速に実行可能で、計算の信頼性が高いオープンソースソフトウェアである有名な線形代数演算ライブラリの LAPACK(Linear Algebra PACKage)をここでは採用する。なかでもプラットフォームとして現在主流である Windows OS で、C 言語で利用可能な数値計算ライブラリである CLAPACK を導入して数値計算を実行する⁴⁾。

表 1 は、この報告書で使用する CLAPACK の二つの関数である。dgesv 関数は Poisson 方程式に、dstev 関数は Schrödinger 方程式を数値計算するために利用する。

表 1: CLAPACK 関数

関数名	用途
dgesv	一般行列の連立一次方程式を計算
dstev	実対称三重対角行列の固有値と固有ベクトルを計算

3 Schrödinger 方程式の差分化

量子力学の基本方程式である Schrödinger 方程式に注目して、その数値シミュレーション方法を紹介する。電子が de Broglie 波長程度の領域に閉じ込められたときの量子力学の基本問題である 1 次元 (x 軸方向) に対して、井戸型ポテンシャル問題を考える。質量 $m[kg]$ の 1 つの電子が、幅 $L[m]$ の空間に以下に示すポテンシャル $V(x)$ によって閉じ込められている。ここで、井戸幅方向である x 軸の原点 ($x = 0$) を井戸端として、もう一方の端を $x = L$ とする。

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 \leq x \leq L \\ \infty & 0 > x, L < x \end{cases} \quad (1)$$

Schrödinger 方程式は次式である。

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right\} \varphi(x) = \varepsilon \varphi(x) \quad (2)$$

ここで、 $V(x)$ はポテンシャル、 \hbar は Planck 定数、 ε は固有エネルギー、 $\varphi(x)$ は波動関数である。

上記の 1 次元 Schrödinger 方程式は 2 階の微分方程式である。よって、数値計算するために微分方程式を差分化する。計算に使用する x 方向の分割 (メッシュ) 間隔を Δx として離散化することで、井戸内を N 点に分割する。井戸端 $x = 0$ を x_0 とし、もう一方の井戸端 $x = L$ を x_{N+1} とする。波動関数 $\varphi(x)$ は $\varphi(x_j)$ として離散値データとして扱われる。ここで、 $j = 0, 1, 2, \dots, N, N+1$ である。二回微分の波動関数は、下記のように差分化される。

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dx^2} \varphi(x) &= \frac{d}{dx} \left\{ \frac{d}{dx} \varphi(x) \right\} \\ &= \frac{d}{dx} \left\{ \frac{\varphi(x_{j+1}) - \varphi(x_j)}{\Delta x} \right\} \\ &= \frac{\frac{\varphi(x_{j+1}) - \varphi(x_j)}{\Delta x} - \frac{\varphi(x_j) - \varphi(x_{j-1})}{\Delta x}}{\Delta x} \\ &= \frac{1}{(\Delta x)^2} \{ \varphi(x_{j+1}) \\ &\quad + \varphi(x_{j-1}) - 2\varphi(x_j) \} \end{aligned} \quad (3)$$

式 (2) を式 (3) によって差分方程式に変換することで、位置 $x = x_j$ における Schrödinger 方程式は下

式として表される。

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{1}{(\Delta x)^2} \{ \varphi(x_{j+1}) + \varphi(x_{j-1}) - 2\varphi(x_j) \} \right\} + V(x_j) \varphi(x_j) = \varepsilon \varphi(x_j) \quad (4)$$

上式を $\alpha, \beta_j, \gamma, E$ を導入して書き直すと次式となる。

$$\alpha \varphi(x_{j+1}) + \beta_j \varphi(x_j) + \gamma \varphi(x_{j-1}) = E \varphi(x_j) \quad (5)$$

ここで、

$$\begin{aligned} \alpha &= \gamma = \frac{1}{(\Delta x)^2} \\ \beta_j &= - \left\{ \frac{2}{(\Delta x)^2} + \frac{2m}{\hbar^2} V(x_j) \right\} \\ E &= -\frac{2m}{\hbar^2} \varepsilon \end{aligned}$$

である。式 (1) の境界条件により、電子は井戸の外で存在できない。すなわち、波動関数 $\varphi(x)$ は井戸端で零となる。

$$\varphi(x_0) = \varphi(x_{N+1}) = 0 \quad (6)$$

式 (5) と式 (6) の関係から、井戸内の $j = 1, 2, \dots, N$ の各 x_j 点で Schrödinger 方程式を立てると次のような N 個の方程式ができる。

$$\begin{aligned} \alpha \varphi(x_2) + \beta_1 \varphi(x_1) &= E \varphi(x_1) \\ \alpha \varphi(x_3) + \beta_2 \varphi(x_2) + \gamma \varphi(x_1) &= E \varphi(x_2) \\ \alpha \varphi(x_4) + \beta_3 \varphi(x_3) + \gamma \varphi(x_2) &= E \varphi(x_3) \\ &\vdots \\ \alpha \varphi(x_{N-1}) + \beta_{N-2} \varphi(x_{N-2}) \\ &\quad + \gamma \varphi(x_{N-3}) &= E \varphi(x_{N-2}) \\ \alpha \varphi(x_N) + \beta_{N-1} \varphi(x_{N-1}) \\ &\quad + \gamma \varphi(x_{N-2}) &= E \varphi(x_{N-1}) \\ \beta_N \varphi(x_N) + \gamma \varphi(x_{N-1}) &= E \varphi(x_N) \end{aligned} \quad (7)$$

ここで、式 (7) は固有値問題であるため、量子数として添字 i を用いて波動関数 $\varphi(x)$ と固有エネルギー E をそれぞれ $\varphi_i(x)$ と固有エネルギー E_i と表記す

る。上式を行列形式で記述すると次式となる。

$$\begin{bmatrix} \beta_1 & \alpha & 0 & \cdots & & & 0 \\ \gamma & \beta_2 & \alpha & 0 & \cdots & & 0 \\ 0 & \gamma & \beta_3 & \alpha & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & \gamma & \beta_{N-2} & \alpha & 0 \\ 0 & & \cdots & 0 & \gamma & \beta_{N-1} & \alpha \\ 0 & & & \cdots & 0 & \gamma & \beta_N \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \varphi_i(x_1) \\ \varphi_i(x_2) \\ \varphi_i(x_3) \\ \vdots \\ \varphi_i(x_{N-2}) \\ \varphi_i(x_{N-1}) \\ \varphi_i(x_N) \end{bmatrix} = E_i \begin{bmatrix} \varphi_i(x_1) \\ \varphi_i(x_2) \\ \varphi_i(x_3) \\ \vdots \\ \varphi_i(x_{N-2}) \\ \varphi_i(x_{N-1}) \\ \varphi_i(x_N) \end{bmatrix} \quad (8)$$

上式を次式のように表記すれば、行列 \mathbf{A} の固有値問題である。

$$\mathbf{A}\vec{\varphi}_i = E_i\vec{\varphi}_i \quad (9)$$

ここで、行列 \mathbf{A} が式 (8) から分かるように三重対角行列となる。よって、前節の表 1 で紹介した d_{stev} 関数を使用して Schrödinger 方程式を数値計算する。

表 2: 固有エネルギーの計算結果

量子数 n	状態	固有エネルギー $E_n[meV]$
1	基底	3.81
2	第 1 励起	15.22
3	第 2 励起	34.24
4	第 3 励起	60.87

表 2 は、井戸幅 $L = 10[nm]$ として数値計算により得たデータである。無限障壁高の井戸型ポテンシャルに対して、解析的に Schrödinger 方程式を解けば次式として固有エネルギーが得られる。

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2 \quad (n = 1, 2, \dots) \quad (10)$$

計算された固有エネルギー値は式 (10) の解析値と比較して 1% 程度の誤差が発生している。これは、今回の数値計算において使用した 1 次元方向の少ない分割数 $N = 200$ が原因である。分割数と誤差の関係は別途計算しているが、本質と異なるため今回詳細については割愛する。 N が増すにつれて計算の精度が向上することを確認しているが、 N の増大は

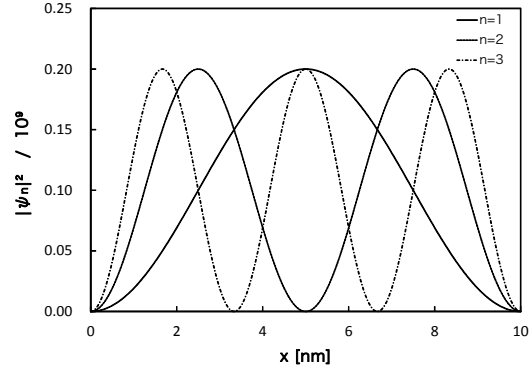


図 3: 井戸幅 10[nm] の井戸型ポテンシャルに対する波動関数の分布

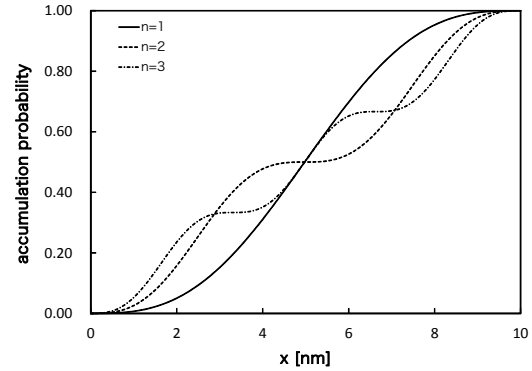


図 4: 井戸幅 10[nm] の井戸型ポテンシャルに対する各状態の累積存在確率分布

計算コスト (時間) の増加に直接関係するため、計算精度には多方面からの検討が必要となる。

図 3 は、表 2 の結果と共に数値計算から得られた波動関数 $\varphi_n(x)$ に対して、下式により波動関数が規格化された $n = 1, 2, 3$ に対応する基底状態と励起状態の存在確率密度分布である。

$$\int_0^L |\varphi_n(x)|^2 dx = \sum_{j=1}^N |\varphi_n(x_j)|^2 \Delta x = 1 \quad (11)$$

式 (11) は、井戸が無限高のポテンシャル障壁に囲まれているため各状態の電子が井戸内にのみ存在することを現している。この波動関数も固有エネルギーと同様に、井戸型ポテンシャル問題の解析値が良く知られている。計算結果は解析値と良い一致を示している。

図 4 は、存在確率密度分布から求めた累積存在確率 $P_n(x)$ である。井戸端 $x = 0$ を基準として $P_n(0) = 0$ 、井戸端 $x = L$ で $P_n(L) = 1$ である。

$$P_n(x_j) = \sum_{y=1}^j |\varphi_n(x_y)|^2 \Delta x \quad (n = 1, 2, \dots) \quad (12)$$

$P_n(x_j)$ 分布により、井戸端 (半導体デバイスでは界面) 近傍における電子分布が推測できる。

電子は、Pauli exclusion principle に従いエネルギーが低い状態から順に状態を占有する。Schrödinger 方程式の計算結果から言えば、表 2 で与えられる基底状態から順に電子が占有される。実際の電子の状態占有については、ここでは扱わない。

図 4 から、少なくとも井戸型ポテンシャルにおいては、電子状態は基底状態から電子のエネルギーが増加するに連れて井戸端に向かって電子の存在確率が増加する事が分かる。また、電子は井戸端の極近傍に向かいその存在確率が急激に減少して、ある程度の電子がほとんど存在しない領域が形成されることが分かる。すなわち、井戸内の電子濃度の変化が井戸端近傍における電子分布に大きく影響することが推測される。

ここでの井戸型ポテンシャル問題は無限高のポテンシャル障壁を仮定しているが、実際問題としてデバイスのモデル化には有限高のポテンシャル障壁問題を扱うことが必要である。そのため、波動関数はポテンシャル障壁内へ侵入する。よって、電子分布はポテンシャル障壁側へシフトする。これについては、別の機会に研究紀要で紹介する予定である。

4 Poisson 方程式

x 軸方向に対する 1 次元の Poisson 方程式は次式である。

$$\frac{d^2}{dx^2} V(x) = -\frac{\rho(x)}{\epsilon_a} \quad (13)$$

ここで、 $V(x)$ は電位分布、 $\rho(x)$ は空間電荷密度分布、 ϵ_a は誘電率である。前節の Schrödinger 方程式と同様の手順により、方程式を差分化して、 x 軸方向に対して離散データを扱うことで、 $V(x_j)$ に対して $j = 1, 2, \dots, N$ の N 個の方程式を立てることが可能となり、連立一次方程式を得る。第 2 節の表 1 で紹介した dgesv 関数を利用することで、数値計算できる。

図 5 は、前節で使用した井戸幅 $L = 10[nm]$ の 1 次元井戸型ポテンシャルを想定して、電子が $1.2 \times 10^{20}[cm^{-3}]$ とかなり高濃度で井戸内に一様に分布していると仮定した場合に、Poisson 方程式を上記の関数により数値計算して得たポテンシャル分布である。高濃度の電子分布により、約 $230[meV]$ のポテンシャル障壁が井戸中央に発生する。

前節で計算した表 2 の固有エネルギー値から分かるように、単純に Poisson 方程式から得られたポテ

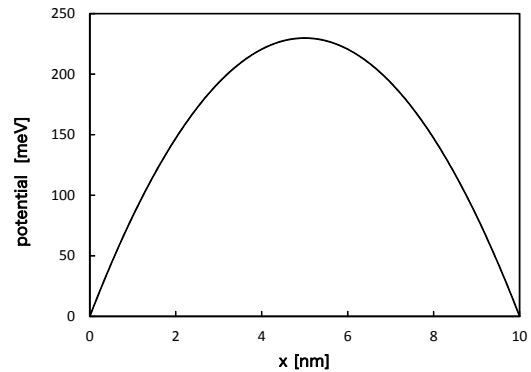


図 5: 井戸内の一様電荷分布によるポテンシャル分布

ンシャルエネルギーと比較すると、Poisson 方程式による電子自身のポテンシャルを考慮すれば電子の固有エネルギーと波動関数が大きく影響を受ける事が推測される。例えば、電子は自身のポテンシャルの影響を受けより界面側へ分布がシフトすることが推測できる。すなわち、実際に電子自身によるポテンシャルの影響を考慮するためには、Schrödinger 方程式と Poisson 方程式を繰り返し計算して、パラメータの変化が収束する様に計算する自己無撞着 (self-consistent) 法を導入することが必要となる。

5 おわりに

半導体デバイスの微細化により、教育現場においても量子効果を取り入れたデバイス特性解析の必要性が増している現状を踏まえて、Schrödinger 方程式と Poisson 方程式を例に数値シミュレーションの方法を報告する。数値計算においては、線形代数演算ライブラリ LAPACK を採用して利便性の向上を図る。極微細な半導体デバイスの簡易モデル化により、この数値計算から量子効果の影響が推測できることが確認できる。

参考文献

- 1) "IC ガイドブック未来を創る半導体", 社団法人電子情報技術産業協会, 2012
- 2) International Technology Roadmap for Semiconductors (ITRS), 2011 Edition (<http://public.itrs.net/>)
- 3) 平本俊郎 編著, "集積ナノデバイス", 丸善株式会社, 2009
- 4) Netlib Repository at UTK and ORNL (<http://www.netlib.org/>)