

半導体デバイスにおける非平衡キャリア輸送

NTT LSI研究所 佐野 伸行

1. はじめに

最近の加工技術の進展に伴い、半導体デバイスのサイズの微細化が進んでいる。一方、デバイスの微細化に伴い、デバイス内部の電界はその強度をさらに大きくすると共に不均一性も強くなっている。[1] その結果、デバイス内におけるキャリアの輸送は、過渡的な状況のもとでの強い非線形輸送過程となる。そこで、このような微細な半導体デバイスにおける動作特性の精度の高い予測・解析には、デバイス内の状況をよく反映した精密なキャリア輸送のモデル化が不可欠となる。一般に、キャリアの輸送解析あるいはデバイスの特性解析には、デバイス・シミュレーションがよく用いられる。本報告では、半導体デバイスに対する一般的なシミュレーションの手法(特に、モンテカルロ法)について簡単に述べる。そして、近年、特に問題となってきた(あるいは、近い将来問題となるであろう)微細デバイスにおける量子効果について述べる。

2. 半古典的デバイス・シミュレーション

デバイス・シミュレーションのもととなる基本方程式は、荷電粒子の輸送に関するボルツマン方程式と電荷分布に対するポアソン方程式である。一般的なデバイス・シミュレーションは、キャリアの運動に関してボルツマン方程式の最低次のモーメントをとってキャリアの電荷保存則を用いた流体モデルや、さらに高次のモーメントまで考慮した緩和時間近似がある。これらの方程式とポアソン方程式を結合させ、適当な境界条件のもとで自己無頓着に解く。実際には、必要となる計算時間や収束性から前者の方法が最も一般的であり、通常のデバイス・サイズ(1ミクロン程度以上)に対しては、かなりよく特性を説明・予測できる。

しかし、前節でも述べたように、デバイスが微細になるにつれキャリアの輸送は非平衡性が強まっており、局所的な熱平衡状態を仮定した上記の方法では、解析が困難な問題が顕著になってきている。例えば、速度オーバーシュート(エネルギーと運動量の緩和時間の差から、キャリアの速度が過渡的な状況のもとで一時的に定常状態の値よりも大きくなる現象)や衝突電離現象(伝導帯にある自由電子が、外場により加速され束縛状態にある電子をバンド・ギャップ以上のエネルギーを介して励起する現象)のようなホット・キャ

リア効果の解析には、厳密なキャリア輸送の過渡的な情報や高エネルギー領域の情報が本質的となり、キャリアの分布関数そのものが解析上必要となる。

そこで、計算時間は膨大になるが、キャリア輸送に関してボルツマン方程式をモンテカルロ法を用いて直接解くという方法も最近では用いられている。〔2〕 計算手法は、波数・実空間でキャリアの運動を散乱体（フォノン・不純物・キャリア・界面等）を考慮しながらシミュレートするというものである。モンテカルロ法は、ボルツマン方程式そのものに対する問題点、例えば、長距離な相互作用をもつキャリア・キャリア散乱など、を除けば、以下で簡単に述べるようにボルツマン方程式を厳密に解くということと等価であり、キャリアの分布関数そのものを任意の時間・点で求めることができる。

バルクにおけるシミュレーションを例にとれば、計算手順は以下ようになる。まず、適当なキャリアの分布関数（初期条件）を仮定し、それぞれのキャリアの自由飛行時間を全散乱頻度の重みのもとで乱数を用いて決め、ある外場のもとで自由飛行させる。そして、自由飛行のあとの散乱過程を、それぞれの散乱体に対する散乱頻度の重みのもとで選び、さらに散乱後のキャリアの終状態をその状態への散乱確率の重みのもとで決める。これを、多数のキャリアに対してある適当な時間まで繰り返し、それぞれのキャリアの最終状態からキャリアの分布関数を求めるというものである。

上記のシミュレーションの手順とボルツマン方程式との対比は、次のようにボルツマン方程式を書けば明かである。もし、キャリア・キャリア散乱を無視すれば、ボルツマン方程式は線形になり

$$\begin{aligned}
 f_{\mathbf{k}}(t) = & e^{-\Gamma_{\mathbf{k}}t} f_{\mathbf{k}}(0) + \int_0^t dt_1 \left\{ e^{-\Gamma_{\mathbf{k}}(t-t_1)} \sum_{\mathbf{k}'} W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') e^{-\Gamma_{\mathbf{k}'}t_1} f_{\mathbf{k}'}(0) \right\} \\
 & + \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \left\{ e^{-\Gamma_{\mathbf{k}}(t-t_1)} \sum_{\mathbf{k}'} W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') e^{-\Gamma_{\mathbf{k}'}(t_1-t_2)} \right. \\
 & \left. \sum_{\mathbf{k}''} W(\mathbf{k}', \mathbf{k}'') e^{-\Gamma_{\mathbf{k}''}t_2} f_{\mathbf{k}''}(0) \right\} + \dots
 \end{aligned} \quad (1)$$

となる。上記のシミュレーション手法は、まさに（1）式のそれぞれの（積分）項を散乱頻度・全散乱頻度等の重みを使って、モンテカルロ法のもとで数値積分することと等価である。尚、（1）式では外場の影響を消すために経路変数を用いて表した。〔2〕

キャリアの運動については、一般に有効質量近似のもとでニュートンの運動方程式に従って決定する。また、散乱体との散乱頻度はフェルミの黄金則から決め、それぞれの散乱は独立で相関は全く無いと仮定する。従って、モンテカルロ・シミュレーションは、キャリアの運動に関しては古典的である一方、散乱過程については量子論的であるために、半古典的な手法である。

最近では、高精度なホット・キャリア効果の解析のために、電子のエネルギー分散の高

エネルギー領域をさらに高精度化する傾向にある。例えば、解析的なバンド構造にかえて、擬ポテンシャル法等により求めた現実的なバンド構造を、キャリアのエネルギー分散に導入するということが行なわれている。[3] さらに、散乱体との散乱頻度に対しても、擬ポテンシャル法等より求めたキャリアの波動関数を用いて行列要素(散乱確率)を直接求め、シミュレーションに導入するということもされており、モンテカルロ法によるシミュレーションは、高度化(厳密化)の一途を辿っている。

以下に、我々のところで進めているフル・バンド・モンテカルロ・シミュレーションの計算結果を用いて、キャリア輸送に関する幾つかの特徴について述べる。我々のシミュレーションの詳しい手法については、他の文献[4]に譲るとして、まず、本シミュレーションの特徴について述べる。バンド構造については、擬ポテンシャル法より求めた現実的なバンド構造を用い、また、散乱過程については、谷間・谷内散乱を一つの結合定数(変形ポテンシャル)で統一的に表す。また、衝突電離過程に関しては、現実的なバンド構造にそくした我々のモデルを導入した。材料としては、Siを想定した。また、初期条件として、時刻ゼロに電子系は格子(300 K)と熱平衡状態にあったとし、その後、一様な高電界(300 kV/cm)をかけたときの電子系の時間発展をシミュレートした。

図1に、ドリフト速度とエネルギーの時間依存性を示す。初期の時間において大きな速度オーバーシュートが見られ、しかも、電界方向によってそのピーク値が異なる。これは、この程度の時間間隔において大多数の電子は、フォノン散乱を受けずに電界によって自由加速されるため、バンド構造の異方性を直接反映していると考えられる。一方、時間が経つにつれこれらの異方性はなくなり、かなり速く定常値に落ち着く。これは、定常状態においては、ほとんどの電子はホットな状態にあって、ブリュアン域の全域にわたって広がり、そのため異方性が平均化されると説明できる。図2には、衝突電離数の時間依存性を示す。ドリフト速度やエネルギーに比べ、大きな異方性が長い時間見られる。これは、ドリフト速度やエネルギーが、すべてのキャリアにより決定される物理量であるのに対して、衝突電離過程が、高エネルギー状態にある少数キャリアによるものであるという事実に基づいている。即ち、電子の高エネルギー領域は、複雑なバンド構造から強い異方性を持っており、その影響が衝突電離過程では顕著になる。一方、ドリフト速度やエネルギーでは、これらの異方性はブリュアン域全域に広がる他の大多数の電子によって平均化され異方性が速く緩和されるわけである。衝突電離過程のこの異方性(図2において、ドリフト速度が殆ど一定の領域における傾きが、いわゆる衝突電離係数と呼ばれるもの)も、定常状態に近づくにつれ小さくなる。

微細なデバイスにおいては、本報告で問題とした程度の時間間隔が、十分に実現可能な領域である。しかも、これらの効果は、本報告で述べたような高精度なモンテカルロ・シミュレーションを用いて、初めて解析が可能となる。従って、将来の微細デバイスにおけ

る物理現象の理解や解析には、本報告で述べたような高精度なシミュレーションが不可欠であり、いまのところモンテカルロ法はそのための最も有効な手段であると言える。

3. 半古典的手法の破綻と量子効果

前節で述べたデバイス解析の計算手法は、すべて半古典的なボルツマン方程式に基づいたものであった。これらの解析手法は、デバイス特性の定性的な指針を与えるという意味で重要であるが、また一方で、高電界やキャリアの高エネルギーに伴う量子効果によるボルツマン方程式そのものの破綻も指摘されている。[5] しかしながら、量子論的な輸送解析に対しては、定量的な数値計算を可能とするような手法がまだ確立しておらず、半古典的な輸送解析におけるモンテカルロ法のような有効な手法の確立が望まれている。

半導体における高電界のもとでの量子効果としては、以下のようなものが考えられる。第一に、キャリアのエネルギーが大きくなるとともに散乱頻度も大きくなり、その結果、散乱時間（散乱と散乱のあいだの時間）が非常に短くなる（数十～数百fs）。そのために、キャリアが散乱体と相互作用する散乱持続時間（フォノン等との衝突をしている時間）が有限であることが顕著になる。つまり、有限な散乱時間の間にキャリアの状態は、高電界により変化してしまう。これがIntracollisional Field Effect (ICFE) と呼ばれるものである。第二に、散乱頻度が非常に高いことにより、散乱時間が有限となりフェルミの黄金律が破綻する。その結果、キャリアのもつエネルギーに不確定性（幅）が生じ、例えば、キャリアのエネルギーがフォノン放出のためのしきい値エネルギーよりも小さい場合でもフォノンを放出することが可能となる。従って、この程度の短い時間スケールでは、エネルギーの保存則が破られていても構わない。これは、collisional Broadening (CB) と呼ばれている。

一方、従来のボルツマン輸送方程式を用いた半古典的な扱いにおいては、散乱は瞬時に、しかも独立に起こると仮定されており、散乱持続時間はゼロである。また、散乱機構については、フェルミの黄金則のもとで計算された散乱頻度を用いており、単位時間当たりの散乱確率は、時間に依存せず一定値をとる。従って、上記のような効果について議論するためには、電子の持つ波動性を考慮した量子論的な解析を行なう必要がある。

最近我々は、半導体における高電界のもとでの量子効果や、光励起した電子系の超高速緩和現象における量子効果について検討を行なっている。[6] 本報告では、後者（超高速緩和現象）における量子効果について簡単に述べる。尚、この系は、外場が存在していないためにうえで述べた後者（CB）の効果のみを直接調べることができ、しかも、実験との対応がつくという点で興味ある問題である。[7] つまり、光励起した電子系の非平衡状態から平衡状態への緩和のような超高速な現象は、最近の極短パルス・レーザーの発展により、直接観測することが可能である。しかし、過去の解析は殆どすべて半古典

的手法によっており、以下で示すような量子効果については殆ど検討されていない。

今回用いた解析方法は、電子系とフォノン系に対する密度行列の量子リユービル方程式を相互作用表示のもとで解くというものである。このとき、フォノン系との相互作用を除いたすべて（もし存在すれば、外場や境界を含めて）を非摂動ハミルトニアンとし厳密に解ける（電子系に対するグリーン関数が求まる）と仮定する。そして、電子・フォノン相互作用を摂動ハミルトニアンとして扱う。相互作用表示のもとで、量子リユービル方程式の解に含まれる2つのS行列を展開し、フォノン系に対する変数についてはトレースアウトすると、以下のような電子系に対する密度行列を導くことができる。

$$\begin{aligned}
 f_{\mathbf{k}}(t) = & f_{\mathbf{k}}(0) + \sum_{\mathbf{q}} |M_0|^2 \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \left\{ G_{\mathbf{k}}^r(t, t_1) G_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^r(t_1, t_2) G_{\mathbf{k}}^r(t_2, 0) \right. \\
 & G_{\mathbf{k}}^a(0, t) D_{\mathbf{q}}(t_1, t_2) f_{\mathbf{k}}(0) + (\text{c.c.}) + G_{\mathbf{k}}^r(t, t_1) G_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^r(t_1, 0) G_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^a(0, t_2) \\
 & \left. G_{\mathbf{k}}^a(t_2, t) D_{\mathbf{q}}(t_2, t_1) f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(0) + (\text{c.c.}) \right\} + \dots
 \end{aligned} \quad (2)$$

今回の解析では、ボルツマン方程式を用いた半古典的解析結果との直接的な比較を可能とするために、電子系に対して一粒子近似で行なった。つまり、電子系に対する真空は空の伝導帯とした。現在のところ、数値解析は非常に限定された範囲でのみ可能であるが、この範囲内で、ボルツマン方程式による半古典的解析の破綻の直接的な検証が可能である。

図3に、電子とフォノンとの相互作用におけるエネルギー保存則からのずれの大きさを光励起してからの経過時間の関数として示す。ここで、格子温度を10 Kとし、またフォノン・エネルギーは30 meVとした。電子は、100 meVに励起したとする。非常に短い時間において、エネルギーの保存則がかなり大きく破れ、またかなり長い時間（数百fs程度）破れが存在することがわかる。一方、この破れの大きさは、光励起した電子のエネルギーに殆ど依存せず、むしろ時間に強く依存することがわかる。従って、熱平衡状態を仮定しダイソン方程式より求めた自己エネルギーから、エネルギーの不確定性を見積るという過去の方法は、緩和過程のような場合明かに正しくない。図4に、リユービル方程式とボルツマン方程式における最低次の補正項まで含めたときの、電子のエネルギー分布関数の時間発展を示す。緩和過程に特徴的な時間スケールが、フォノン場の振動に対する時間スケールに近いためにエネルギーの不確定性が大きくなり、二つの結果が大きく異なる。ここで最も重要なのは、out-scattering項（励起エネルギー近傍のピーク）における量子効果の影響は小さい一方で、in-scattering項（励起エネルギーからフォノン・エネルギーだけずれたピーク）では大きく影響を受けるということである。この結果を用いれば、従来の半古典的ボルツマン方程式を拡張することが可能である。即ち、ボルツマン方程式におけるすべてのout-scattering項について和をとり、in-scattering項においてのみCBの効果

を導入する。この拡張したボルツマン方程式を用いてさまざまな緩和・輸送過程を解析することは、とても興味深い問題である。事実、超高速緩和過程においてCBの効果が高エネルギー領域において顕著に見られるなどの解析結果が得られている。

4. まとめ

半導体デバイスの動作特性やデバイス内部でのキャリア輸送現象についての、一般的な数値解析法（デバイス・シミュレーション）について簡単に述べた。そして、半古典的ではあるが、現在のところ、最も高精度で信頼性の高いフル・バンド・モンテカルロ・シミュレーションについて、幾つかの解析結果と共に紹介した。また、デバイスの微細化に伴うボルツマン方程式そのものの破綻と量子効果について述べた。具体的な解析例として、光励起した電子系の非平衡状態から平衡状態への超高速な緩和過程に対して、ボルツマン方程式による半古典的な計算結果と量子リウービル方程式による結果との直接的な比較を通して、量子効果について簡単な検討を行なった。

謝辞

本稿で報告した内容は、NTT LSI研究所の富沢雅彰氏、同 吉井彰氏、同 光エレクトロニクス研究所のウエイン・ルイ氏との共同研究である。また、日頃ご指導いただく同 LSI研究所の平田一雄氏に感謝します。

参考文献

- [1] S. M. Sze, Physics of Semiconductor Devices, 2-nd ed. (Wiely, New York, 1983).
- [2] C. Jacoboni and P. Lugli, The Monte Carlo Method for Semiconductor Device Simulation (Springer, New York, 1989).
- [3] M. V. Fischetti and S. E. Laux, Phys. Rev. B 38, 9721 (1988).
- [4] N. Sano and A. Yoshii, Phys. Rev. B 45, 4171 (1992); N. Sano, M. Tomizawa, and A. Yoshii, Proceeding of CAMSE'92.
- [5] J. R. Barker and D. K. Ferry, Phys. Rev. Lett. 42, 1779 (1979).
- [6] N. Sano and A. Yoshii, J. Appl. Phys. 70, 3127 (1991); N. Sano and A. Yoshii, Semicond. Sci. Technol. 7, B36 (1992).
- [7] N. Sano, W. Lui, and A. Yoshii, submitted to Phys. Rev. B.

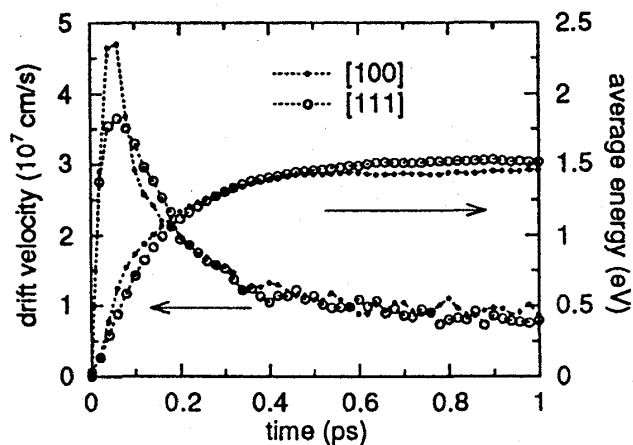


図1 フル・バンド・モンテカルロ・シミュレーションより求めた電子のドリフト速度とエネルギーの時間発展。初期の電子は格子温度 (300K) で熱平衡状態にあったとし、 $t=0$ に高電界 (300kV/cm) を2方向にかけ、10000個の電子をシミュレートした。

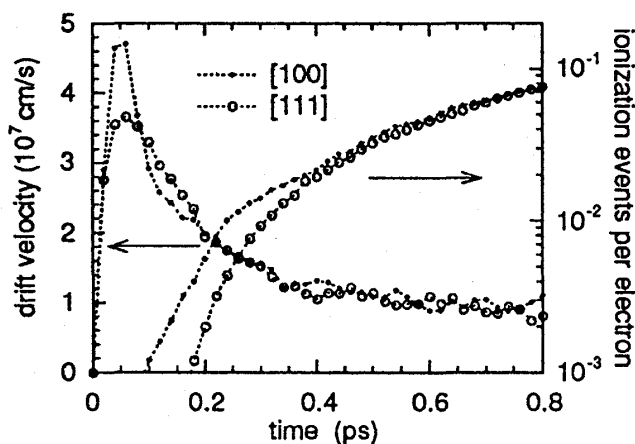


図2 フル・バンド・モンテカルロ・シミュレーションより求めた電子のドリフト速度と衝突電離数の時間発展。シミュレーションの条件は図1と同じである。

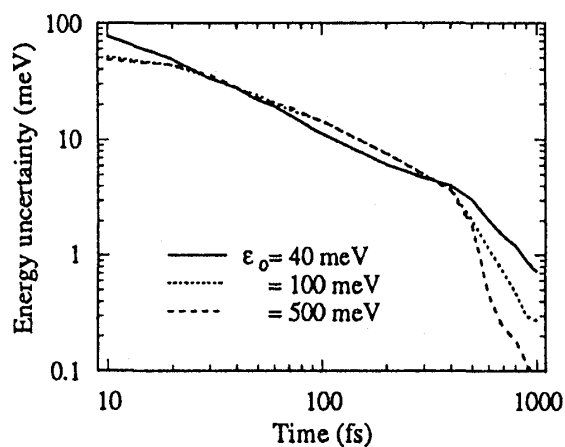


図3 量子リュービル方程式のin-scattering項から求めたフォノン散乱におけるエネルギーの不確定性の時間依存。 ϵ_0 は電子の励起エネルギー。

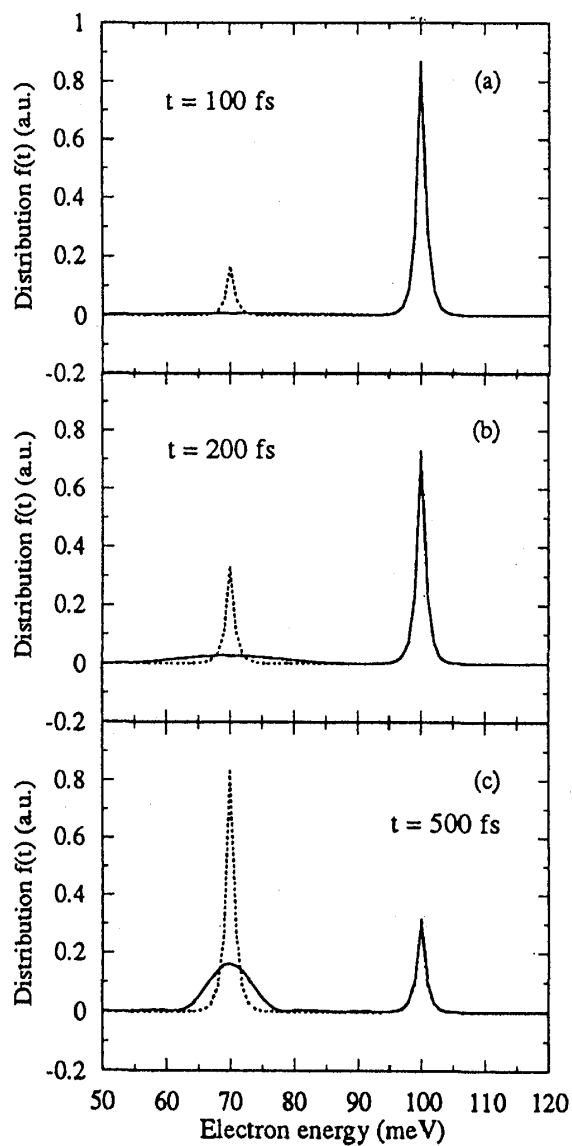


図4 量子リュービル方程式（実線）とボルツマン方程式（点線）から求めた電子のエネルギー分布関数の時間発展。励起エネルギーとフォノン・エネルギーはそれぞれ100meVと30meV。