

## ■9 群-4 編-5 章

### 5-3 デバイスシミュレーション

(執筆著者：藤代博記) [2012年1月 受領]

#### 5-3-1 デバイスシミュレーションの概要

デバイスシミュレーションは、デバイス内のキャリア輸送と電位分布を自己無撞着に解くことによりデバイス特性の予測と物理現象の解析を行う手法の総称である。これまで設計・解析の有力なツールとして半導体デバイスの高性能化を支えてきた。デバイスシミュレーションは、キャリア輸送を記述するボルツマン輸送方程式に基づく連続流体モデルと、キャリアのミクロな運動モデルに基づくモンテカルロ法に大別される。これらはドリフト過程を古典力学的、散乱過程を量子力学的に扱うため、半古典的な手法と呼ばれている。

一方、今日では微細加工技術や結晶成長技術の進展によりナノスケールのデバイスの作製が可能となってきた。このようなナノスケールの領域では、エネルギーの量子化やトンネル効果などの量子力学的な効果が顕著に現れるようになるため、半古典的な手法ではデバイス特性の予測が困難となる。そのため、量子輸送理論に基づく量子力学的デバイスシミュレーションの開発が行われている。

#### 5-3-2 連続流体モデル

連続流体モデルは、キャリア輸送を記述する半古典的ボルツマン輸送方程式の低次のモーメントにより導出した粒子数、運動量、エネルギーの3つのバランス方程式を数値的に解くことによりキャリアの時間応答を計算するもので、デバイスの境界条件の下でポアソン方程式と自己無撞着計算することにより、サブミクロンデバイス内のキャリアの非平衡輸送を解析できる<sup>1)~3)</sup>。3つの緩和時間は後述するモンテカルロ法により計算できる。ここで運動量緩和時間がエネルギー緩和時間よりも短いことを考慮して、運動量バランスを準静的に扱う近似を導入し、得られた2式とポアソン方程式を連立して解く手法をエネルギー輸送モデルと呼ぶ。この場合、キャリアのドリフト速度は移動度により準静的に電界と関係付けられるが、キャリア温度の上昇は考慮される。このモデルはデバイス内のキャリアの走行時間に対して運動量緩和時間が十分に短い状況に対応しており、ホットエレクトロン効果などの解析には有効である。更にデバイスサイズが大きくなりキャリアの走行時間がエネルギー緩和時間よりも長くなると、エネルギーバランスも準静的に扱うことができる。そこでキャリア温度が格子温度に一致するという近似を導入するとドリフト拡散方程式が得られる。このドリフト拡散方程式とポアソン方程式を連立して解く手法が古典的なドリフト拡散モデルである。

#### 5-3-3 モンテカルロ法

モンテカルロ法は多数のキャリアのドリフト過程と散乱過程をミクロな物理モデルに基づいて確率論的に計算し、その軌跡を追跡することによりキャリアの時間応答を計算するもので、デバイスの境界条件のもとでポアソン方程式と自己無撞着計算することにより、サブミクロンデバイス内のキャリアの非平衡輸送を解析できる<sup>1)~4)</sup>。ここでキャリアのエネルギーバンドを有効質量を用いた近似式で表現する手法を解析的バンド・モンテカルロ法、数値計算したバン

ド構造をそのまま適用する手法をフルバンド・モンテカルロ法<sup>5)</sup>と呼ぶ。モンテカルロ法ではキャリアのドリフト過程は古典的な運動方程式に基づいて計算されるが、散乱過程はフェルミの黄金率を用いて量子力学的に計算される。キャリアは全散乱レートによって決定される自由時間だけドリフトを行った後、確率論的に散乱機構が選択され、また散乱後の終状態が決定される。これらをすべてのキャリアについて行った後、ポアソン方程式を解いて電位分布を更新する。解析的バンド・モンテカルロ法ではエネルギーバンドが谷ごとに独立した放物線で近似されるため、高エネルギーのキャリアの振る舞いを正確に計算することが困難である。一方、フルバンド・モンテカルロ法は高エネルギーのキャリアの振る舞いを正確に計算することができるが、計算に時間を要する。

### 5-3-4 量子力学的デバイスシミュレーション

量子力学的デバイスシミュレーションの代表的な手法としてウイグナー関数法や非平衡グリーン関数法などが知られている<sup>6)7)</sup>。ウイグナー関数法は量子力学的ボルツマン輸送方程式（ウイグナー輸送方程式）に基づいてキャリア輸送を計算するもので、量子補正をプランク定数の2次の項まで採り入れた量子補正半古典モデルを用いる手法は特に量子補正流体モデル及び量子補正モンテカルロ法と呼ばれている<sup>7)</sup>。これらは従来の連続流体モデルやモンテカルロ法の資源を活用しながら量子力学的な効果を取り入れたシミュレーションを行うことができるため、ナノスケールデバイスの現実的な設計・解析ツールとして利用されはじめている。

#### ■参考文献

- 1) 富澤一隆：“半導体デバイスシミュレーション—CGで可視化するサブミクロンデバイスの世界—”，コロナ社，1996。
- 2) k. Tomizawa：“Numerical Simulation of Submicron Semiconductor Devices,” Artech House, 1993.
- 3) 山口 憲, 富澤一隆：“非平衡電子輸送論—半導体デバイスシミュレーション—”，アドバンスソフト出版事業部，2011。
- 4) C. Moglestue：“Monte Carlo Simulation of Semiconductor Devices,” Springer, 1993.
- 5) K. Hess (ed.): “Monte Carlo Device Simulation: Full Band and Beyond (Kluwer International Series in Engineering and Computer Science),” Springer, 1991.
- 6) D. Querlioz and P. Dollfus：“The Wigner Monte-Carlo Method for Nanoelectronic Devices: Particle Description of Quantum Transport and Decoherence,” Wiley-ISTE, 2010.
- 7) 三好旦六, 小川真人, 土屋英明：“ナノエレクトロニクスの基礎,” 培風館, 2007.

## ■9 群-4 編-5 章

### 5-5 回路シミュレーション

(執筆者：井上 晃) [2011年11月受領]

回路シミュレーションは、抵抗、コンデンサ、導体などにより構成される受動回路と、トランジスタやダイオードなどの能動回路が混在した回路全体の電気特性を計算で求めるアナログ回路シミュレーションとロジック回路の論理演算を計算するデジタル回路シミュレーションに大別されるが、以下ではアナログ回路シミュレーションについて概説する。

受動回路部については、抵抗、キャパシタンス、インダクタンスの集中定数で表現するか、 $S$ パラメータなどの複素パラメータ表示により回路シミュレータに記述する。複素パラメータが分からない場合には、受動回路部の形状や材料を基に電磁界シミュレーションにより複素パラメータを求めて回路シミュレータに取り込んでシミュレーションを行う。

能動回路部については、前節のデバイスモデルなどを用いて回路シミュレータで扱えるようなモデルを定義して回路シミュレーションを行う。モデルは一般に小信号動作であれば線形モデルでよいが、大信号動作やミキサなどの非線形動作を計算するには、非線形モデルが必要となる。回路シミュレーションに適用するには、モデルが電荷の保存則や高次微分項も含めた関数の連続性などの基本的な関係を満たしている必要があることから、非線形モデルの定式化には細心の注意が必要である。

回路シミュレーションには、大別して①DC解析、②AC解析(小信号解析)、③雑音解析、④大信号解析(非線形解析)がある。更に、大信号解析は、定常状態になった後の電気特性を計算する定常解析と、過渡状態を計算するトランジェント(過渡)解析に分けられる。

DC解析では回路網の各ノードにおいて直流状態での電圧・電流をキルヒホッフの法則により計算する、AC解析では回路網の複素パラメータについて行列演算して所望の端子でのAC特性を計算する。雑音解析では雑音等価回路などを用いて雑音を求める。AC、DC解析は線形回路について解を求める演算であり、一意に解ける。一方、大信号解析では非線形方程式を解くことになることから、解を得るには解の収束性について考慮したうえで、適切な手法を選択する必要がある。

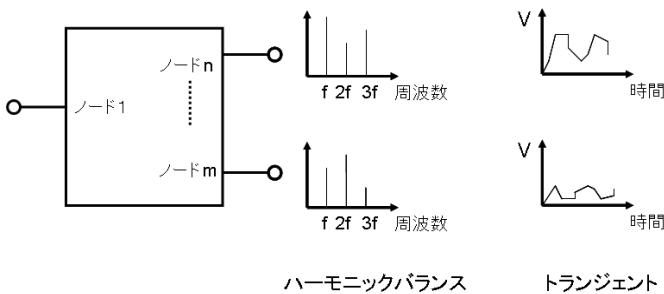


図 5・1 大信号解析手法

大信号解析の定常解析としては、ハーモニックバランス法が多用されている(図 5・1)。ハーモニックバランス法では回路網の各ノードにおける入力波、反射波について基本波(周

波数  $f$ ) と高調波 (周波数  $2f$ ,  $3f$  など) の各成分について計算し, 全ノードの高調波の計算結果が矛盾しなくなるまで計算するもので, 高調波のバランスがとれる解を求める手法である. 周波数領域での計算なので, 計算時間が比較的短い利点がある. 一方, 過渡解析の手法としては SPICE などで行われているトランジェント解析が広く用いられている. トランジェント解析では, 時間の経過とともに各ノードの電圧・電流がどのように変化するか, 所望の時間間隔で逐次計算していく手法であり, 時間間隔が細かいと膨大な計算時間を要する. マイクロ波帯以上の回路シミュレーションでは時間間隔を短くしなければならないことから, ハーモニックバランスの方が計算時間が短いため多用される. しかしながら, 発振や信号の立ち上がり特性など, 過渡的な応答が重要な回路では, トランジェント解析が用いられる. 近年の回路シミュレーションでは両手法を組み合わせることでシミュレーション時間を短くするなどの工夫を行い, 過渡から定常状態まで容易にシミュレーションできるよう改良が進められている.