

研 究 解 説

ナノシミュレーション・システム

Nano-Simulation Systems

大 野 隆 央*

Takahisa OHNO

1. は じ め に

シリコンデバイスは急速な勢いで微細化を進め高性能化・高集約化を追求している。0.1 μm 以下のナノメートルの極微細化領域に入るシリコンナノデバイス構造では、その能動素子である金属—絶縁膜—半導体 (MIS) 構造トランジスタにおいて既に、ゲート絶縁膜には厚さ 1.5 ~ 2 nm のシリコン酸化膜、あるいはこれに相当する高品質な誘電体薄膜が要求される。ナノスケール領域においても微細化のトレンドを押し進め、次世代以後のシリコンナノデバイス開発を実現するためには、ナノスケールに微細化された表面・界面に関する抜本的な技術的ブレークスルーが必要とされる。特に、ゲート絶縁膜に用いる高品質な高誘電体薄膜の探索、ナノスケールに超薄膜化した金属—絶縁膜—半導体構造等のナノ界面構造での電気伝導現象の解明は、次世代シリコンナノデバイス発展の鍵を握っている。また、ナノ表面・界面構造の形成技術も従来技術とは異なる原子スケールの加工技術を必要とする。シリコンナノデバイスの他にも、水素終端表面上の原子細線、ナノチューブ、有機分子等のナノ細線構造、チオール分子、生体分子等の吸着した表面—分子系等、様々なナノ構造のデバイス応用が提案されているが、ナノ構造で初めて発現する新奇な機能の探索、そしてその機能を実現するためのナノ構造制御に関する知見が強く求められている。これらの課題については世界的に激しい競争環境下で研究が行われているが、実験主体の経験的・絨毯爆撃的な研究開発が採られており、いまだ解決していない。

我々は、これら次世代ナノデバイス開発における技術的ブレークスルーの実現に資するため、第一原理計算手法を主な解析手法として用いて、ナノ構造の形成・構造・物性・機能を高精度に予測出来るシミュレーション・システムの開発を行っている。具体的には、第一原理電子状態計

算手法を基本解析手法とし、原子レベルの構造解析、誘電体特性解析、伝導特性解析手法を開発する。以下に、4つの研究項目の内容を概説する。

2. 研 究 項 目

2.1 ナノプロセス解析に関する研究

ナノデバイスを開発するためには、ナノデバイスの構成要素となる絶縁体—半導体界面や絶縁体—金属界面等のナノ界面構造に代表される多様なナノ構造を原子スケールで形成・制御することが第一義的に重要である。例えば、0.1 μm 以下の極微細化領域のシリコンナノデバイス構造では、ゲート絶縁膜には厚さ 1.5 ~ 2 nm のシリコン酸化膜 (約 10 分子層厚またはそれ以下) が要求される。このようなナノ構造を形成・制御するため、表面・界面における反応過程等のナノ表面・界面構造の形成過程、形成されるナノ構造の微視的原子構造と構造安定性、ナノ界面構造における欠陥構造等、ナノ構造のプロセスに関する第一原理解析技術を開発する。形成されるナノ構造の基礎的な電子物性を予測するために、絶縁体—半導体界面等のナノ界面構造における界面準位、バンド不連続、バリア高さ等の電子状態に関する第一原理解析手法を開発する。ナノ構造の形成・制御には、シミュレーションによる解析・予測・モデルを実験的検証により高精度化することが必須であり、トンネル電子顕微鏡 (STM)、振動数解析等の実験結果を第一原理的に解析するための手法を開発する。解析手法は密度汎関数理論に基づく第一原理解析手法を基礎とする。さらに、多数原子が構造・機能に関与するナノスケール物質・構造を解析するため、異なる解析手法を融合させたハイブリッド手法等の大規模数値解析手法も開発する。

2.2 誘電体の物性解析に関する研究

次世代シリコン ULSI 素子構造の微細化では、誘電体材料の開発がキー技術となることは明白である。コンデンサ容量を保持するための薄膜化が、トンネル電流による絶縁

*東京大学生産技術研究所 計算科学技術連携研究センター
物質・材料研究機構 計算材料科学研究センター

破壊を起こす限界膜厚に到達しつつあり、絶縁破壊を引き起こさずに従来通りの微細化を押し進めるためには、高誘電材料の使用が不可欠である。逆に、高周波数での素子の使用は寄生容量の小さな低誘電率材料を要求している。さらに、薄膜化によるバルク結晶からの誘電率変化、Sr (Ba) TiO₃ を初めとした多種多様な誘電体材料の存在は素子設計を増々複雑にしている。我々は、今後の誘電体材料の設計及び探索に必須な、誘電応答に関する信頼性のあるシミュレーション技術を開発する。誘電体が示す誘電応答は、電子系と格子系の誘電応答から構成される。誘電体のバルク結晶において、価電子状態と伝導電子状態の電子系が示す誘電応答、格子変位・格子振動等の格子系が示す誘電応答、各々に関する第一原理計算手法を基礎とした解析手法を開発する。誘電体の薄膜化によるバルク結晶からの誘電応答の変化を解析するために、誘電体薄膜の示す誘電応答を計算するための解析手法を開発する。解析手法は密度汎関数理論に基づく第一原理的解析手法を基礎とし、ランダム位相近似法、ローレンツ・ローレンツ近似法、準粒子法等の手法を採用する。

2.3 ナノ構造の機能解析に関する研究

次世代シリコンナノデバイスでは、極微細化によりチャネル能動領域寸法は50~100nmとなり、キャリアの平均自由行程と同程度になる。このため、電気伝導特性に対する一様・平均的なモデルは破綻し、誘電体-シリコン界面等における界面乱れや不純物イオンの離散的分布等によるキャリア電子個々の散乱過程を考慮することが必要である。また、チオール分子を用いたシリコン基板上の電界効果トランジスタの例のように、生体分子等の吸着した表

面-分子構造、原子細線、ナノチューブ等のナノ細線構造、絶縁体-半導体界面等のナノ界面構造などのナノ構造の伝導特性のデバイス応用には、伝導特性を量子論的に解析し予測することが不可欠である。ナノ構造を量子力学的に伝播する電子波の特性、即ち、ナノ構造内のコヒーレントな伝導、ナノ構造間のトンネル電流等を解析し、ナノ構造で発現する量子的な伝導特性・機能を探索するために、時間発展密度汎関数法による実時間シミュレーション手法、Lippmann-Schwinger法による定常電流計算手法等の量子伝導特性の解析手法を開発する。

2.4 ナノシミュレーション・システムの開発

上記の研究項目で開発した解析手法をシステム化し、次世代半導体ナノデバイスに必要な材料探索、ナノスケールで発現する物性予測・機能設計を実現するナノシミュレーション・システムを開発する。ナノシミュレーションでは、マイクロからメゾスケールにおける種々の物理法則に基づくシミュレーション・プログラム、データベースを組み合わせて駆使することが必要である。ナノシミュレーション・システムでは統合環境プログラムの下に、図1に示すように、量子論に基づく電子状態計算プログラムとマルチスケールシミュレーションの要素プログラムからなる共通基盤プログラム群、ナノプロセス解析プログラム群、誘電体物性解析プログラム群、ナノ構造の機能解析プログラム群、データベース群を統合化する。統合環境プログラムは、プログラムの実行、入力パラメーター作成、結果表示を支援するGUIを提供し、プログラム間の連携を支援する。また、各研究項目で実施される実証計算をナノシミュレーション・システム上において実施するとともに、ナノシミュ

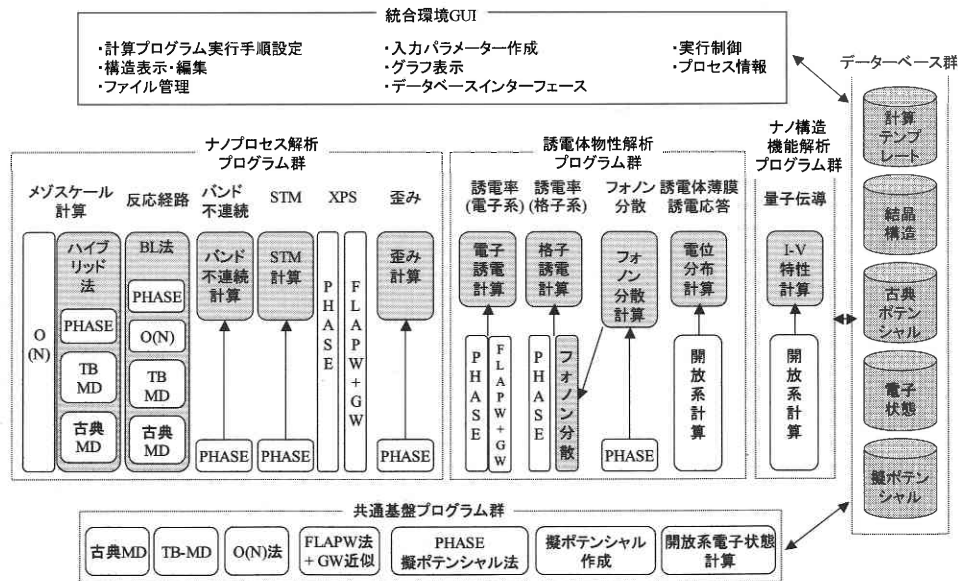


図1 ナノシミュレーション・システムの概念

表1 SiO₂の電子系及び格子系誘電率

誘電率 ϵ	Calc.	Obs.
ϵ_{elec} (電子系)	2.5	2.4 ^a
ϵ_{vib} (格子系)	1.1	1.5
ϵ (全誘電率)	3.6	3.9

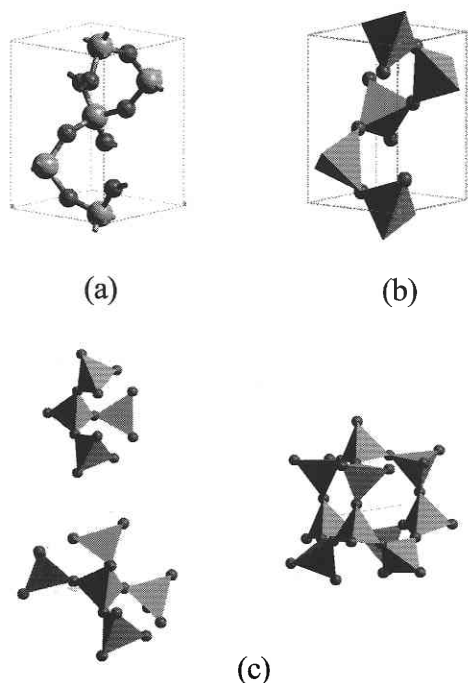
^a屈折率実測値より計算

レーション・システムの実証性を評価するためにナノプロセス解析, 誘電体物性解析, ナノ構造の機能解析の系統的な実証計算を実施する。

3. 解析事例

3.1 格子系誘電率を含む全誘電率計算

本手法により SiO₂ (クリストバライト) の電子系及び格子系誘電率を計算した。SiO₂ の結晶構造を図 2 (a) に, その多面体表示を図 2(b) に示す。4 面体構造が SiO₄ 多面体である。計算は図 2(c) の SiO₂ クラスタを用いた。クラスタの電子及び格子分極率は B 3 PW 91 DFT 分子軌道法を用いて計算した。表 1 にその結果を示す。計算値は電子系及び格子系誘電率の値を良好に再現した。この結果は, 電子・格子系誘電率が第一原理シミュレーションにより予測可能であることを示している。本プログラムは格子振動を考慮して誘電体の設計を行うことができる世界初のシステムとなる。

図2 SiO₂結晶とクラスタ構造

ムとなる。

3.2 量子伝導計算

2つの金電極に挟まれたベンゼン-(1,4)-ジチオレート¹の無限小バイアス下でのコンダクタンスを計算し, コンダクタンスが接点構造に強く依存することを示した。図3に二つの構造を示す。(a)は分子系のS原子が金表面のhollow siteに結合している構造である。(b)はS原子がon top siteに結合している構造である。コンダクタンスはそれぞれ0.003 G₀, 0.058 G₀(G₀=2e²/hは量子化コンダクタンス)と大きく異なっていることがわかる。分子そのものの性質の他に接点に関する情報が非常に重要であることが明らかとなった。

3.3 ハイブリッド法による大規模計算

原子間力顕微鏡 (AFM) における像解像度は探針先端構造に敏感に依存することがよく知られている。しかし, これまでの AFM 解析では, 原子数の制約から探針としては数個の原子からなるモデル構造が用いられてきた。図4

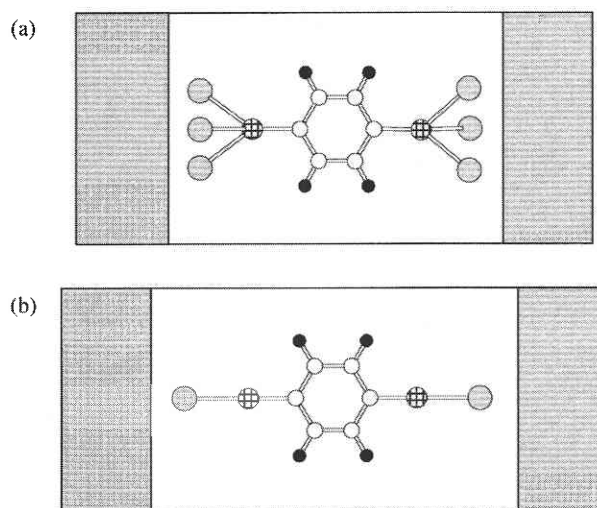


図3 金電極に挟まれたベンゼン-(1,4)-ジチオレート分子

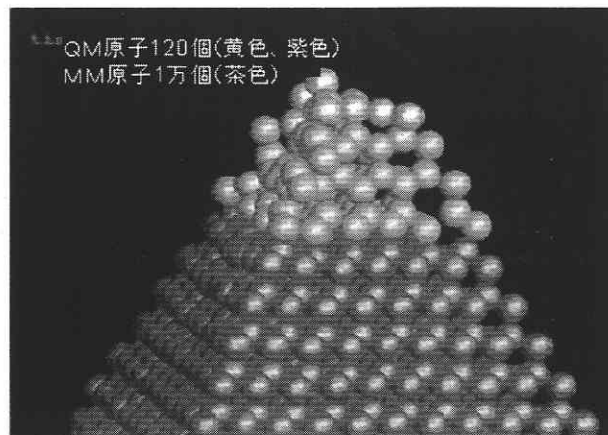


図4 AFMチップ先端の構造

(口絵カラーページも参照) はシリコン探針構造のハイブリッド法による動力学計算のスナップショットで、先端の約 120 個の原子 (紫と黄色の球) を QM で残りの 1 万個の原子 (茶色の球) を MM で取り扱っている。計算は 9 個の原子 (紫の球) が平面をなす構造から出発したが、常温ではそれらがダイナミックにゆらいでいることがわかった。しかし、平均的には凸な曲面を持ち、とくに 1 個の原子が突出している確率が大きいことがわかった。この結果は先端構造についてのこれまでの予想を裏付けるものである。

4. お わ り に

本システムは、次世代半導体・ナノデバイスの研究開発を支援するツールとして開発している。次世代半導体開発に対応して、特に、微細化によるゲート絶縁膜のリーク電流の解析、high-k 材料の探索のために、量子伝導計算や誘

電体の物性解析に関する機能強化を行った。後者においては、世界初の格子系誘電率計算プログラムを開発し、high-k 材料などの誘電率の評価ができるようになった。また、次世代以降の電子デバイス開発では、これまでの延長上にある技術を極小化に対応するように開発することの他に、極小化の極限として一つの分子に機能を盛り込む事も考えられてきている。上記の量子伝導計算機能はこの様な先端研究分野でも有用と考えられる。その他、ナノテクノロジー分野の電子デバイス開発一般への応用 (カーボンナノチューブの伝導など) も予定している。

今後はユーザー会を発足し、ユーザーの意見を採り入れ、応用に適した機能強化を行う。また、データベース・グラフィカルユーザーインターフェースを強化し、ユーザーに使いやすい総合環境を提供する。

(2003 年 3 月 24 日受理)