

# Kinetic Monte Carlo シミュレータの基礎

東京大学大学院工学系研究科機械工学専攻 泉 聡志

## 1 kMC の基礎

### 1.1 アルゴリズム

拡散定数  $D$  の粒子  $i$  の拡散過程を考える。

$$D = D_0 \exp(-\Delta E/kT) \quad (1)$$

ここで、 $\Delta E$  は活性化エネルギー、 $k$  はボルツマン定数である。この粒子  $i$  が  $\delta$  の距離（格子間距離）をジャンプする事象が起こる速度は、三次元で、

$$R_i = 6D/\delta^2 \quad (2)$$

である<sup>1</sup>。すべての粒子の中から粒子  $i$  の拡散ジャンプが起こる場合の時間間隔はポアソン分布に従い、以下の式で表せる。

$$\Delta t = \frac{1}{\sum_i R_i} \ln \chi \quad \chi: \text{一様乱数} \quad (3)$$

また、 $R_i$  は拡散過程だけでなく、例えばクラスタ粒子の分解等の異なる事象も速度が決まれば同じように扱える。

Kinetic Monte Carlo 法 (以後 kMC) で、最も一般的な正攻法では、この現象を以下のようなアルゴリズムでシミュレーションする。

1. 初期配置を作成
2. 事象の選択（拡散・クラスタ粒子の分解・新しいインプラなど）
3. 事象を起こす原子の選択
4. 選択した原子に事象を起こす
5. 自発的に起こる事象（クラスタリング・再結合）を起こす
6. 時間を  $\Delta t$  進めて、2. へ戻る

不純物や不純物クラスタのまわりの拡散バリアの変化等の効果も盛り込むことが出来る。クラスタリングや再結合にエネルギー障壁がある場合は確率過程（事象）として扱う。

kMC のアルゴリズムには、目的に応じて効率的なアルゴリズムがいくつか考案されている<sup>2</sup>。また、大規模計算においては長周期の擬似乱数は必要となるため、メルセンヌ・ツイスター法<sup>3</sup>を用いた。

<sup>1</sup>第一回講義ノート 拡散の微視的捉え方参照

<sup>2</sup>待ち時間法など

<sup>3</sup>2<sup>19937</sup> - 1 周期、<http://www.math.keio.ac.jp/matsumoto/mt.html> より

## 1.2 解析例

1次元 random walk simulation の粒子位置の確率密度分布を図 1 に示す。ただし、初期は位置 0 にすべての粒子を配置している。kMC ステップは 100,000 で粒子数は 1000 個である。拡散プロファイルは解析式とほぼ一致していることがわかる。このように拡散問題を離散的に解くことが出来る。

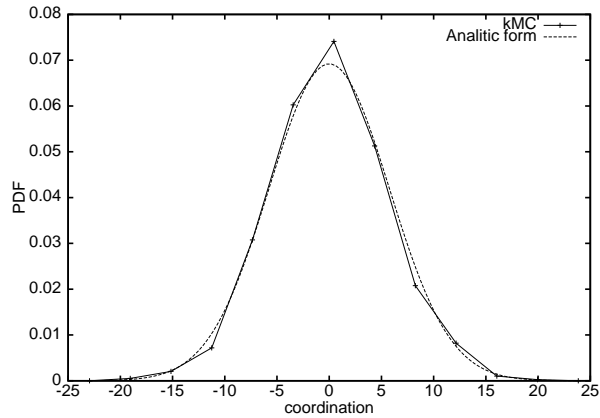


図 1: Random Walk Simulation by kinetic Monte Carlo method

## 2 kMC の半導体プロセスシミュレーションへの応用例

### 1. B・As・C のシリコン内の拡散・クラスタ化

ボロンやヒ素の拡散過程は、単純なランダムウォーク過程ではなく、複雑な過程を経る。例えば、ボロンは、図 2 に示すように、Interstitial と結びつき、置換サイトから追い出され、遠くまで拡散することができる。これを増速拡散と呼ぶ。ヒ素は、空孔を媒体に、図 3 のように空孔アシスト型拡散を起こす。

これらの拡散プロセスは、反応・拡散方程式となり、一般に解析的に解くのは難しい。しかしながら、kMC 法でそれぞれの現象が起こる確率を入力パラメータに、現象を起こしてやることにより、現象の再現が可能である。

### 2. V のクラスタ化

図 4 は空孔がクラスタ化していく過程を kMC でシミュレーションしたものである。このような拡散とクラスタ化の現象も一般的には解析的に扱いにくいだが、kMC を使うと、クラスタのエネルギーのデータがあれば簡単に解ける。

#### [反応拡散方程式]

反応方程式では、濃度が、濃度の関数で変化する。

$$\frac{\partial u}{\partial t} = F(u) : \text{反応方程式} \quad (4)$$

これと、下記の拡散方程式が結びついたものが反応拡散方程式である。

拡散方程式：

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} : \text{拡散方程式} \quad (5)$$

反応拡散方程式：

$$\frac{\partial u}{\partial t} = F(u) + D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} : \text{反応拡散方程式} \quad (6)$$

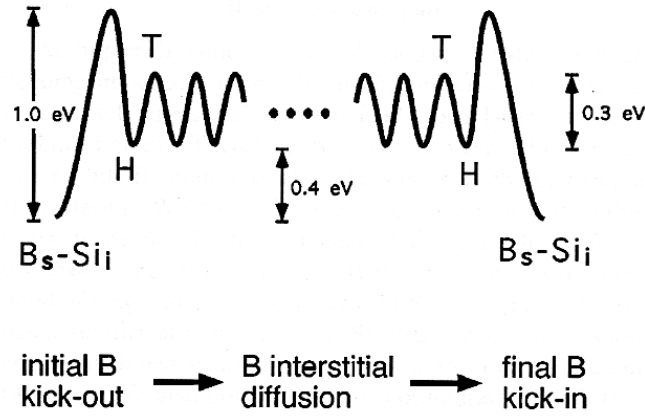


FIG. 3. Schematic energy diagram for the kick-out mechanism of B diffusion in Si. The substitutional B atom is being kicked out by an interstitial Si atom into the interstitial region. The resulting B interstitial can then migrate along the hexagonal-tetrahedral-hexagonal path for quite a long distance before falling back to another substitutional site. The energy barrier for the initial kick-out is about 1.0 eV. The energy barrier for the final reverse kick-out in the absence of vacancies is 0.6 eV, which is much higher than the B interstitial migrational barrier 0.3 eV.

図 2: TED model of born

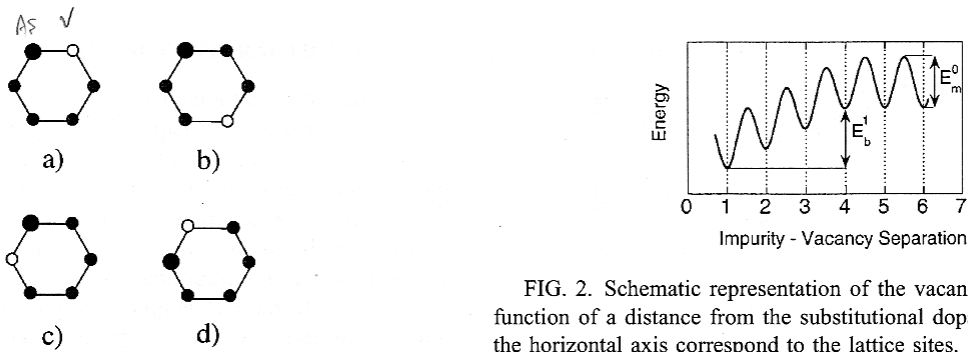


FIG. 2. Schematic representation of the vacancy potential as a function of a distance from the substitutional dopant. Numbers on the horizontal axis correspond to the lattice sites.

FIG. 1. The impurity-vacancy migration on a diamond lattice. The figure shows the ring process that enables the impurity displacement in the direction “downwards.” The filled circle represents the impurity, the empty circle—the vacancy. Panel (a) shows the starting configuration of the impurity-vacancy pair. (b) shows the vacancy on a third-nearest-neighbor site while moving along the ring path. In (c) the vacancy approaches the impurity from the new direction, which enables the impurity jump as depicted in (d).

図 3: Vacancy-mediated diffusion of As

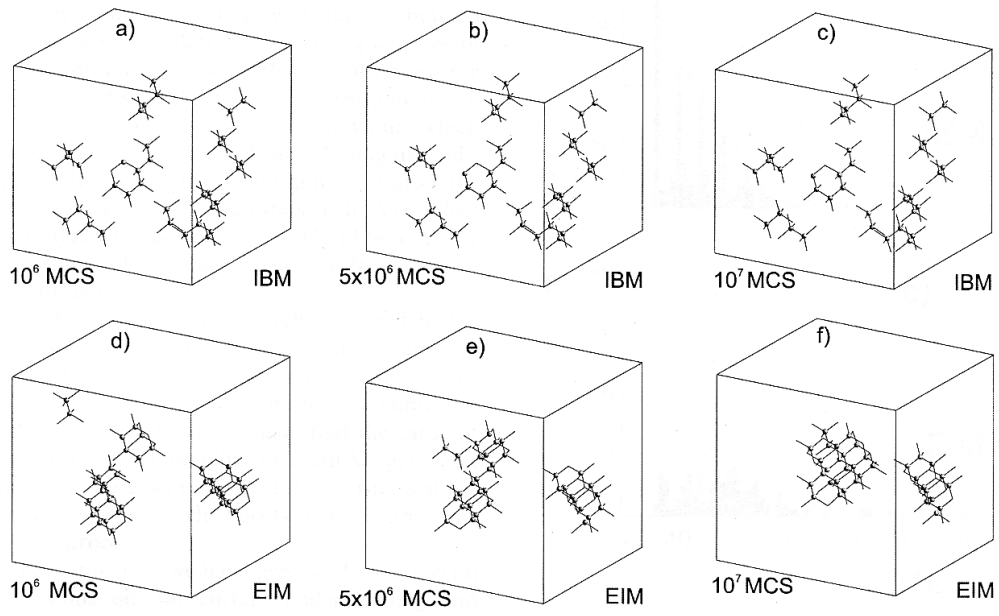


Fig 3. Snapshots of V clusters obtained by the IBM (a-b-c) and the EIM (d-e-f) after  $10^6$ ,  $5 \times 10^6$  and  $10^7$  Monte Carlo steps (MCS).

☒ 4: Lattice kinetic Monte Carlo calculation for V cluster