

# 半導体デバイス3次元TCADシステムの開発

小池 秀耀\* 山口 憲\*\*

## Development of Advanced 3D Technology CAD System for Semiconductor

Hideaki Koike\*

Hideaki Koike\* and Ken Yamaguchi\*

### 1. はじめに

科学技術振興機構(JST)は平成 23 年度研究成果最適展開支援プログラム(A-STEP)本格研究開発ステージ 実用化挑戦タイプにおいてアドバンスソフト株式会社が提案した「半導体デバイス 3 次元 TCAD システム」を採択した。これに伴い、アドバンスソフト株式会社は本格的な TCAD の開発に着手した。開発期間は平成 23 年度から平成 27 年度で、開発担当者はアドバンスソフト株式会社である。このプロジェクトの目的は、世界レベルの本格的「半導体デバイス 3 次元 TCAD システム」を開発し、事業化することである。

この JST プロジェクトは開始されたばかりであるが、国産の TCAD を開発する重要な機会と考える。ここでは「半導体デバイス 3 次元 TCAD システム」の開発プロジェクトについて紹介する。ただし、このプロジェクトは開発するソフトウェア・システムの基本設計を終了したところであり、まだ公開できない部分も多い。

ここでは、企画提案書をもとにプロジェクトについて紹介する。

### 2. プロジェクトの概要

#### 2.1. プロジェクトの目的

TCAD(Technology CAD)システムは LSI の

\*アドバンスソフト株式会社 代表取締役社長  
Representative director president , AdvanceSoft Corporation

\*\*アドバンスソフト株式会社 コンサルティンググループ  
Consulting Group, AdvanceSoft Corporation

設計、開発に不可欠であるが、産業用 TCAD は欧米のシノプシス社とシルバコ社にほぼ独占されている状況である。一方、LSI の微細化、高度化に伴い 3 次元、量子輸送などを考慮した次世代 TCAD の開発が必要となっている(ITRS: International Technology Roadmap for Semiconductors 参照)。

アドバンスソフト株式会社と明治大学(以下「われわれ」という)は JST 産学協同シーズイノベーション化事業・顕在化ステージ「MOS 反転層内量子化された電子の弾道輸送の研究」においてバリスティック輸送機構を組み込んだ次世代デバイスシミュレーション技術を開発し、アドバンスソフト株式会社は、これを発展させ、パワーデバイスへの対応、GUI を整備した実用的 3 次元デバイスシミュレータ「DESSERT」を開発し販売してきた。このシミュレータは高性能を認められ、大学、研究機関など 5 機関に販売している。しかし設計等で広く使用されるためにはプロセスシミュレータと一体化した TCAD システムの開発が不可欠である。

また、次世代 TCAD システムには原子分子の挙動を解析する第 1 原理計算ソフトウェアも不可欠である。アドバンスソフト株式会社は「文部科学省次世代 IT 基盤構築のための研究開発」において世界に通用する第 1 原理計算ソフトウェア PHASE の開発に中核メンバーとして参加、販売および保守を行っている。

プロジェクトの目的は、これまでの研究成果、シーズをもとにプロセスシミュレータを含む世界レベルの本格的「次世代 3 次元 TCAD システム」を開発し、事業化することである。

## 2.2. 開発する製品

本開発では次世代 TCAD システムを開発する。「次世代 3 次元 TCAD システム」とは半導体の微細化、高度化に伴い現状の TCAD システムでは対応できない課題を解決するシステムである。具体的特徴は以下のとおりである。

微細素子の解析機能の強化

- ・バリスティック輸送解析
- ・CMOS インバーターの一括解析
- ・3 次元解析（微細素子、パワーデバイスでは不可欠）
- ・並列コンピュータへの対応
- ・プロセスの 3 次元形状追跡、3 次元自動メッシュ
- ・大規模計算の高速化
- パワーデバイスへの対応
- ・フローティング電極のロバスト解析
- ・デバイスの 3 次元形状近似の高度化
- 次世代素子対応：複雑な構造や複数トランジスタの一括解析
- 第 1 原理計算との連携（材料探索など）

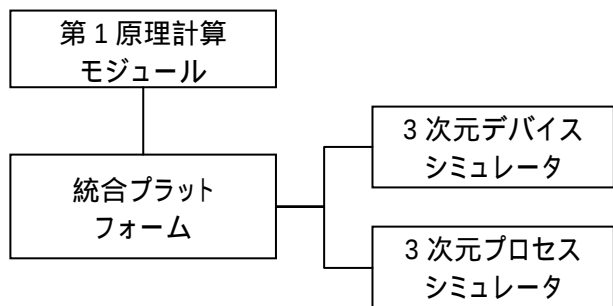


図 1 次世代 3 次元 TCAD システム

## 2.3. ターゲット市場

メモリー、ロジック、パワーデバイスなど半導体デバイス製造企業全体がターゲット市場といえるが、競合他社（シルバコ社、シノプシス社）との関係性を考えると、市場は 3 次元効果が無視できなくなる超微細加工素子およびパワーデバイスの設計、研究開発がターゲットとなる。これらの分野では、われわれの「次世代 3 次元 TCAD システム」が競合他社より優位となり、

しかも、今後大きく発展することが期待できる市場である。特にパワーデバイスは電気自動車、グリーングリッド等の関係で市場が急成長することが見込まれる。

## 2.4. 企業化に向けた研究開発プロセス

商用版の「次世代 3 次元 TCAD システム」の開発は次のようなステップを踏む必要がある。

基礎研究（シーズの創出）

シーズを育成し基本的機能に関する試作ソフトウェアを開発し、本格的開発の見通しを得る。

既に、のステップは完了しており、本提案は次に述べる項番以降のステップにある。

商用版ソフトウェアのβ版の完成（β版とは商用ソフトウェアのプロトタイプである。このソフトウェアは世界的レベルのものであり競争力のあるものであることが必要）

β版をユーザに配布し、その要望、批判にこたえて改良し、パッケージとして出荷できる商用版の完成。

継続的に保守改良を行い、高度なソフトウェアに育成。

本開発終了後、アドバンスソフト株式会社がビジネスベースで、のステップを実施する。アドバンスソフト株式会社は「文部科学省次世代 IT 基盤構築のための研究開発」プロジェクトにおいて中核企業として参画し、PHASE 等のソフトウェアの事業化を実現してきた実績がある。

## 3. 開発内容

### 3.1. シーズ（A-STEP 提案以前の技術蓄積）の概要

#### (1) シーズの内容・特徴

プロセス、デバイスシミュレータ、第 1 原理計算および統合プラットフォームからなる「次世代 3 次元 TCAD システム」を開発する。開発にあたってのシーズは以下の通りである。

## バリスティック輸送解析

マイクロコンピュータやメモリー素子などの半導体デバイス（主に MOSFET）は産業を支える基盤技術であり、図 2 に示すように、高性能・高機能を目指し、限りなく微細化が進められている。ナノメートル領域を運動する電子は古典的散乱からバリスティック輸送へと移行し、増幅率や応答速度にプラスの効果が期待される（図 3 参照）。バリスティック輸送を高度に利用したデバイス開発が今後の高性能化研究にお

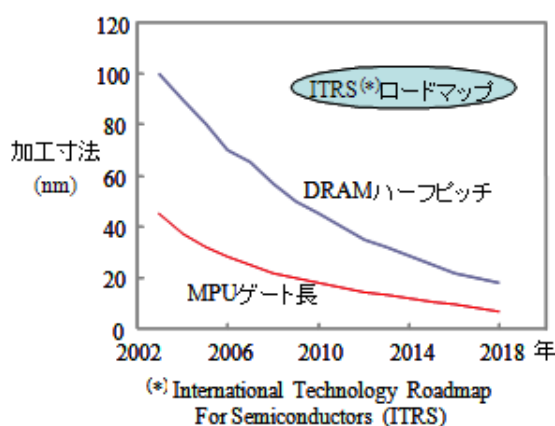
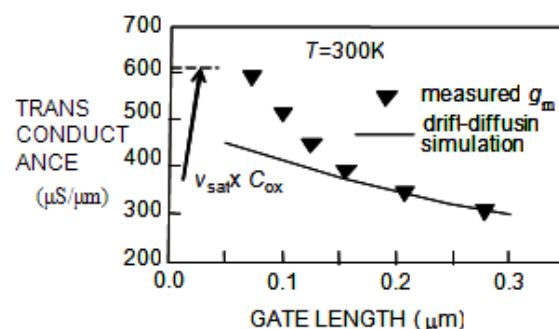


図 2 微細化のトレンド

いて必要不可欠である。

バリスティック輸送のモデルを表 1 に示す。大きく分類すると電子を荷電粒子とみなし散乱機構を乱数によりモデル化しニュートンの運動方程式を解く“モンテカルロ法”と、“ボルツマン方程式”を基礎として体系付けられた流体モデルが知られている。いずれもバリスティック輸送を精度よく解析するためには莫大な計算時間を必要(1)とし実用的 TCAD ツールとはなっていない。



G. A. Sai-Halasz, Ext. Abs. 20<sup>th</sup> Conf. Solid-State Devices and Materials, Tokyo, 1988, pp. 5 - 8

図 3 弾道輸送効果の報告例

表 1 デバイス特性解析法の分類

| モデル分類 | 手法                | 特性解析法                |
|-------|-------------------|----------------------|
| 粒子モデル | モンテカルロ法           | 1 粒子モデル ⇒ 緩和係数算出     |
|       |                   | 多粒子モデル ⇒ デバイス特性評価    |
| 流体モデル | ドリフト 拡散 (DD)モデル   | 速度-電界特性 ⇒ 電流-電圧特性    |
|       | エネルギー/運動量 バランスモデル | エネルギー ⇒ 速度 ⇒ 電流-電圧特性 |

そこで、平成 20 年度 JST 産学共同シーズイノベーション化事業の下、われわれは、電子（正孔）が強いゲート電界を感じながらソースからドレインへバリスティック輸送されるときに受ける散乱機構の成分の相関関係を精査し、各因子の依存性に応じた成分分離を行うことで、精度向上と計算処理速度向上の両立が図られることを示した。

次世代デバイスシミュレータのプロトタイプ (Advance/DESSERT)

3 次元効果解析を汎用的に可能とすべく、ドリフト拡散(DD)型モデルを元に自社独自技術による 3 次元デバイスシミュレータ (Advance/DESSERT)を試作し、販売してきた。本シミュレータは、複雑なデバイス構造を簡便入力支援する GUI を備えた、強靱な収束性を持

つソルバである。超微細構造 MOSFET を始めパターンのゆらぎ、TFT、イメージセンサー、高耐圧素子等、応用範囲が広い。更に、バンドギャップ依存性が殆どなく、パワー用デバイスとして期待される近年の材料(SiC, GaN 等)に対しても強い収束性を持つ特徴がある。

DD モデルはボルツマン方程式の 0 次オーダーの解である物質保存則を基本としたモデリングであり、これに 述べて高精度緩和係数導出法と、後述する一般化移動度モデルを組み合わせることで、バリスティック輸送に関する高精度・高速計算を可能とした。

### 第 1 原理計算プログラム

(Advance/PHASE)

これまで材料定数の見積りはある程度の大きさを持ったバルクを前提としているが、次世代 TCAD では超微細構造における材料の特性を予測することが要求される。これには量子力学に基づく第 1 原理計算が必要となり、第 1 原理計算と TCAD との連携が必須となっている。

アドバンスソフト株式会社は、文部科学省「次世代 IT 基盤構築のための研究開発」プロジェクトの中で平面波基底関数法に基づく第 1 原理計算ソフトウェア PHASE の開発に携わり、更に、それを独自で改良整備し、販売している。本ソフトを用いて約 1 万原子をモデル化した半導体中の不純物準位の解析を実行した実績がある。

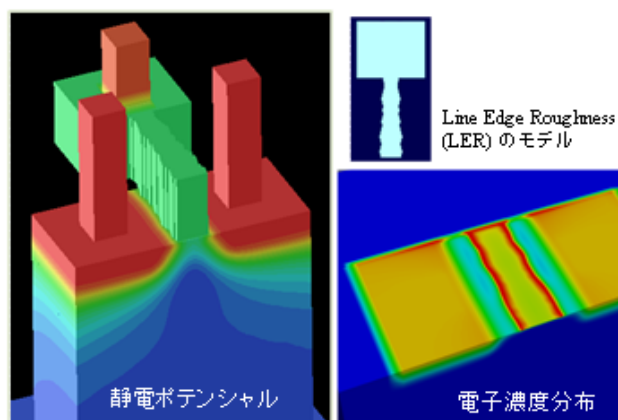


図 4 ゲート端のゆらぎ(LER)

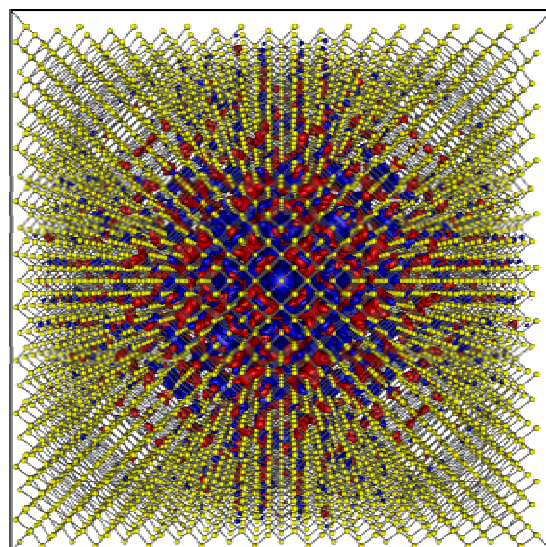


図 5 文部科学省「次世代 IT 基盤構築のための研究開発」プロジェクトで実施した PHASE による計算例

### (2) 背景及び競合技術の研究開発動向

TCAD システムは米国のシノプシス社とシルバコ社がほぼ独占している[2]。しかし、両社の主力製品は 2 次元 TCAD システムであり 3 次元解析が必須となる超微細素子解析においてはその地位を確立していない。また、今後重要となるパワーデバイスの解析機能も市場のニーズに对应していると言えない。わが国の半導体メーカーが総力を挙げて取り組んだ株式会社半導体先端テクノロジーズの TCAD システム (ENEXSS) も半導体先端テクノロジーズが 2011 年 3 月に解散したため、その行先は不透明となった。素子の微細化は進む一方で、加えて、従来 TCAD の主要な対象ではなかったパワーデバイスでも TCAD の重要性が急増している。この技術動向については、最も権威あるレビューである ITRS が莫大な改良課題を提起すると共に、半導体産業の不況の影響で TCAD の開発が停滞していることが半導体産業の発展にとっての障害要因だと指摘している。

要約すれば既存 TCAD システムを超える次世代 TCAD が必要とされながら、既存のベンダはこの要求に对应されていない。本提案はこの状況を踏まえ、ITRS のロードマップの中でも緊急の研究開発課題に取り組むものである。具

体的な研究開発課題は、いずれも激しい研究開発競争にある。この研究開発を成功させれば、米国 TCAD ベンダより技術的優位になる。以下、具体的な研究テーマの研究開発動向について述べる。

### バリスティック輸送解析

バリスティック輸送のモデル化は研究レベルのものから商業ベースのものまで幾多の提案があるが、実用的レベルに達している技術は皆無である。産学協同シーズイノベーション事業・顕在化ステージにおいて精度と計算時間の相殺関係を打破する手法の機能確認を行えたことは、今後のデバイス設計ツール開発の大きな一歩となった。

### CMOS インバーター並びに複数トランジスタの一括解析

高密度実装 LSI では図 6 に示すようにデバイス間の近接効果が無視しえなくなる。高集積 LSI 設計に関する既存 TCAD 技術は MOSFET デバイス断面 2 次元モデルと回路解析を組合せた Mixed mode (3) が主流である。個別デバイスを外部結線で接続する回路解析方法では内部電位やキャリアの素子間移動を正確には反映できない。高密度実装 LSI の高信頼度設計には複数デバイスの一括解析が望まれる由縁である。

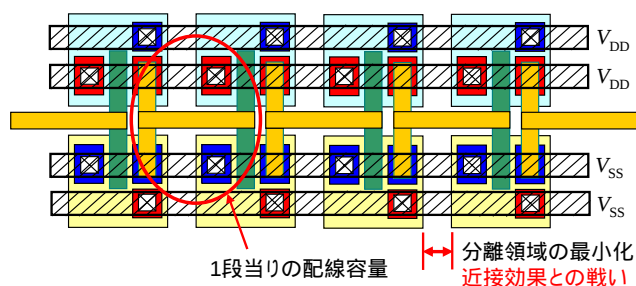


図 6 CMOS インバーターの密集配列例

### プロセスの 3 次元形状追跡

3 次元プロセスシミュレータ開発の困難さはプロセスの進行に伴い刻々と変化する 3 次元形状の追跡と 3 次元自動メッシュの処理である。未だロバスト性も含め十分に満足のいく 3 次元プロセスシミュレータは開発されていない。本

研究では流体解析で利用されているレベルセット法または VOF 法を採用し実用的な形状追跡法を確立する。一方自動メッシュは 4 面体メッシュを採用、安定したソルバの開発とメッシュの切り直しの最小化を図り、計算時間を短縮する。

### 並列コンピュータへの対応

3 次元解析は多大の計算時間を要するため高速化が必須である。本研究開発では近年発達している並列コンピュータ用に最適化したソフトウェアを開発する。既存のソフトウェアは並列コンピュータ以前に開発されているため、分散メモリータイプの並列計算機に対する十分な並列化は行われていない。

### 大規模計算の高速化

並列化とともに非線形解法と線形ソルバを改良する。

### フローティング電極のロバスト解析

パワーデバイスの解析においてはフローティング問題に対するロバスト解析が不可欠である。本提案では手法を改良し、ロバスト性を実現する。図 7 の問題を安定に解けるようにする。

### 第 1 原理計算との連携（材料探索など）

LSI も新しい材料の探索と共に、応力、誘電率等の物性値の評価が重要となっている。このため第 1 原理計算と TCAD の連携が重要となっている。われわれは世界的レベルの第 1 原理計算ソフト PHASE を開発、販売している。このソフトを次世代 TCAD に組み込む。このような TCAD で実用的なものは存在しない。

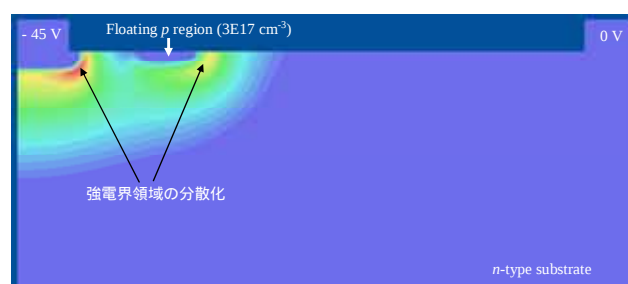


図 7 ガードリング付き Si ダイオードの解析例（電界強度分布図）

### (3) これまでに A-STEP 開始以前に得られている研究成果

#### バリスティック輸送解析

MOSFET 反転層内電子のバリスティック伝導を物理的に考察し、緩和係数決定要因を分析した。結果、次の 3 つのパラメータが主要因であることを明確にし、一般化移動度モデルを提案した。

主要因子：電子(正孔)のエネルギー( $w$ )、ゲート電界( $E_G$ )、不純物濃度( $N$ )

一般化移動度による電流の式：

$$J_n = -nv = \mu(w, N, E_{\perp}) n E_{\perp} + D(w, N, E_{\perp}) \nabla n + \mu(w, N, E_{\perp}) n \nabla \left( \frac{k_B T_e}{q} \right)$$

主要因子が 3 個あることは、必要な情報が 3 次元データ構造をなし、高精度なデータを完備するに要する時間が天文学的数値となる。われわれはデータ間の依存性を理論的かつモンテカルロ法シミュレーションにより詳細に解析し、3 変数データ構造は 1 次元データの組合せで表現可能なことを明らかにした。これにより、緩和係数を高精度で且つ高速に取得可能とし、実用化への道筋を明らかにできた。一方、ボルツマン輸送方程式から導出される運動量・エネルギーバランス方程式を従来の電流連続式とカップルさせて数値解析するモデル化は従来から知られているが、フルカップル方式には多大な計算時間を要する。これに対して、高精度・高速に処理する方法が明治大学から提案され、アドバンスソフト株式会社は複雑なデバイス構造にも適用可能、且つ高速に処理できるアルゴリズムの検討とプログラム化の具体策を明確化した。

ゲート長 25nm のデバイスにおいて、バリスティック効果の影響の大きさを示した(図 8 参照)。また、モンテカルロとの比較による流体モデルの精度検証を実施し、誤差 10% の範囲で、精度良く再現できることを示した(図 9 参照)。

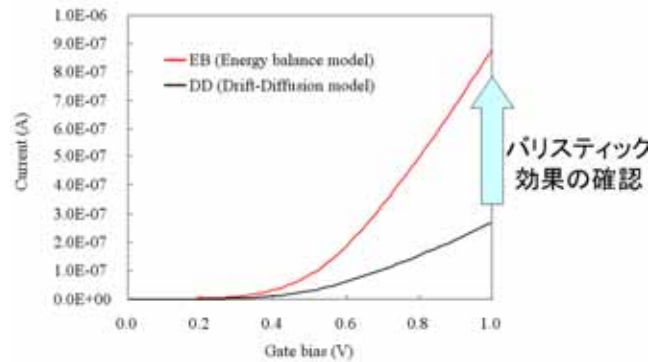


図 8 25nm ゲート MOSFET におけるバリスティック効果の検証

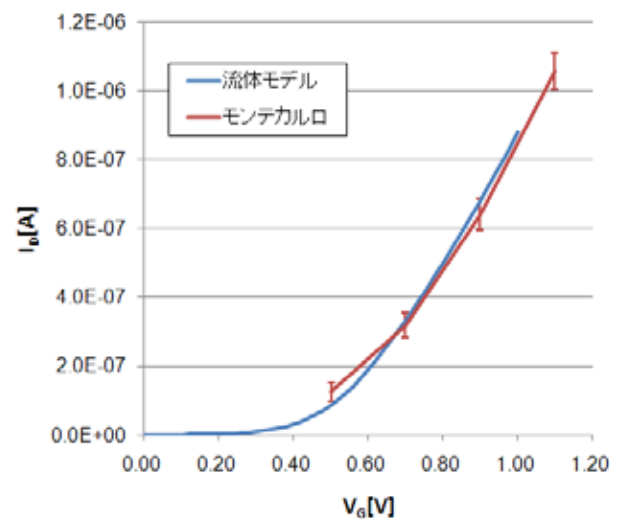


図 9 流体モデルとモンテカルロによる精度検証

#### CMOS インバーター並びに複数トランジスタの一括解析

n-MOSFET と p-MOSFET を直接接続し、接続部分をヘテロ接合とすることでトンネル電流をモデル化した例を図 10 に示す。n-ch と p-ch をデバイス解析レベルで接続し、素子内部の電位分布を一括解析した実績がある。超微細化に伴い発生する LER(Line Edge Roughness)は正に 3 次元解析特有の課題であり、図 11 に示すような実績がある。

#### プロセスの 3 次元形状追跡

流体解析において VOF 法およびレベルセット法による 3 次元表面形状追跡ソフトを開発した。また 3 次元自動メッシュ生成ソフトを実装したプリプロセッサを開発した。

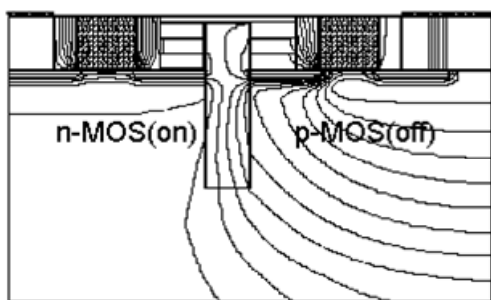


図 10 CMOS インバーター括解析例  
(Solid-State Electronics, vol.46, no.6.  
pp.807-817, June2002)

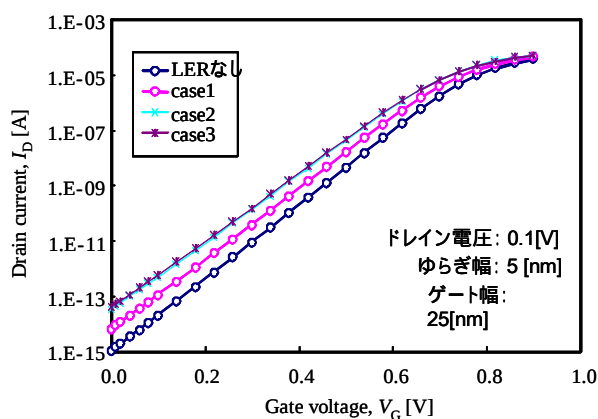


図 11 ゲート端のゆらぎ(LER)による電流 - 電圧特性のバラツキ

#### 並列コンピュータへの対応

第 1 原理計算、流体解析等で地球シミュレータ等への並列ソフトを多数開発した実績がある。

#### 大規模計算の高速化

流体、構造解析等で高速化の実績がある。

#### フローティング電極のロバスト解析

シリコンダイオードであるが、浮遊領域付き構造(図 12)で耐压解析の実績がある。ワイドギャップ半導体解析でも、図 13 に示す如く、ギャップ幅に依存しない強靱な収束性を示している。ワイドギャップ系で且つ浮遊電極を持つ構造解析におけるロバスト性向上は今後の課題である。

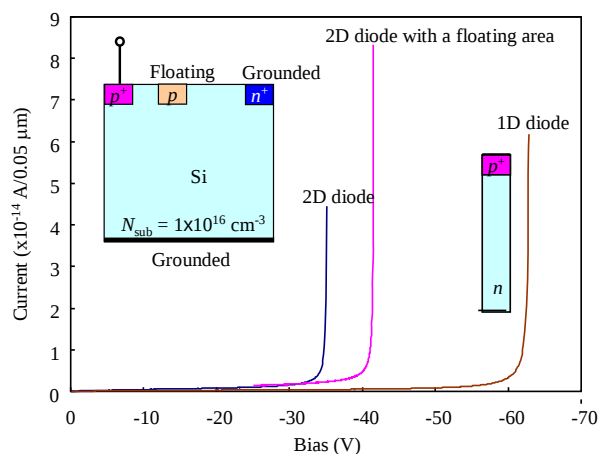


図 12 浮遊領域付き Si ダイオード解析

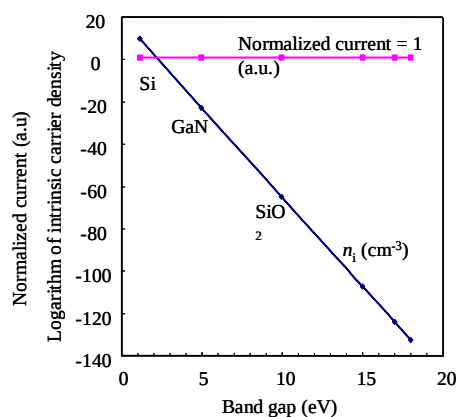
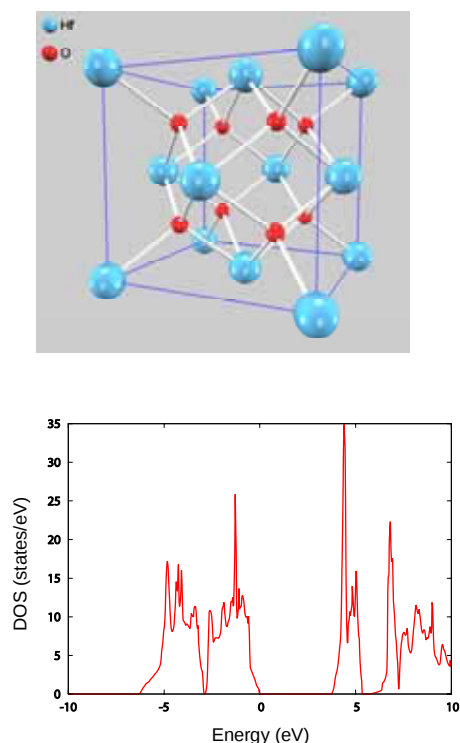


図 13 ワイドバンドギャップ半導体でも安定収束

#### 第 1 原理計算との連携 (材料探索など)

材料シミュレーションでは約 1 万原子のシリコン結晶解析例を始め、次世代 TCAD ツールで必要とされる新材料、例えば高誘電材料 HfO<sub>2</sub> のバンド構造(図 14)、セリウム酸化物の誘電率、仕事関数を始めハイパワーデバイス応用として期待の高い新材料 GaN 中の原子欠損等、広く解析実績がある。新材料・デバイス開発には欠陥の存在や不純物の混入に代表される原子配置の乱れ、異種材料間の接合面に形成される界面準位の発生とデバイス特性に与える影響等を評価しなければならず、その際には大規模計算が必須となる。Advance/PHASE では大規模解析、材料特性解析等の機能確認ができています。

図 14 高誘電材料  $\text{HfO}_2$  のバンド構造解析

#### 4. シーズを基にした製品・サービスの概要

##### (1) 最終的に目指す製品・サービス

本研究開発で目指す最終的な製品「次世代 3 次元 TCAD システム」イメージを図 15 に示す。このシステムは 3 次元デバイスシミュレータ、3 次元プロセスシミュレータ、第 1 原理計算ソフトおよび統合プラットフォームからなる。プロセスシミュレータは一連のプロセス・フローを網羅する計算機能が組み込まれており、一連のプロセス・フローを入力で与えることで、最終的な素子形状と不純物分布を求めることができる。さらにプロセスシミュレータの出力をデバイスシミュレータに受け渡すことにより、デバイスシミュレータが  $I-V$  特性等の素子の特性を計算する。材料探索を第 1 原理計算モジュールで行うこともできる。これらの計算は統合プラットフォーム上で有機的に連携して行うことができる。

プロセスシミュレータとデバイスシミュレータのおもな特徴と解析機能を表 2、表 3 に示す。

#### 5. 企業化に向けた開発プロセス

大型の商用ソフトウェアの開発は 基礎研究、

商用版のプロトタイプ（ベータ版）の開発、商用ソフトウェアの開発と事業化という手順が必要であり、大規模なソフトウェアを一人前にするには 10 年近い期間が必要である。本提案は 商用版のプロトタイプの開発である。事業化のためには、開発したソフトウェアのフォローが必要不可欠である。研究開発構想に組み込まれている必要がある。図 16 に事業化に向けた本プロジェクトの位置付けを示す。国からの資金援助を受けた本プロジェクト終了後アドバンスソフト株式会社は事業化に取り組み、事業化 → 開発資金の獲得 → 継続的改良という正のフィードバックを確立する。これにより、「次世代 3 次元 TCAD システム」の保守・開発体制を確立する。

アドバンスソフト株式会社は「文部科学省次世代 IT 基盤構築のための研究開発」に参加し、世界的レベルの基盤的ソフトウェアを開発するとともに、この事業化に取り組んでおり、成功を収めつつある。この実績と経験、ノウハウにより、本プロジェクトの成果を確実に事業化できる見通しがある。

## 概念図【次世代3次元TCADシステムの研究開発】

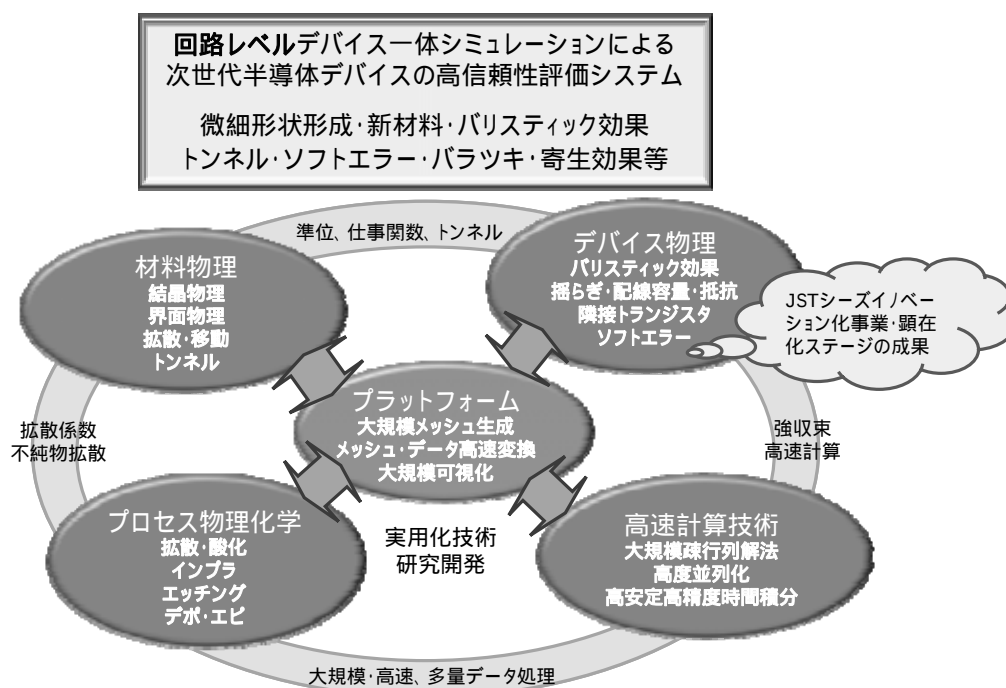


図 15 次世代 3 次元 TCAD システム

表 2 プロセスシミュレータのおもな機能と特徴

|                                                                          |                                                                                                                                                                                                             |
|--------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| イオン注入解析<br>アニール<br>熱酸化<br>デポジション<br>エッチング<br>CMP<br>プロセス・フローの制御<br>数値計算法 | ピアソン、デュアルピアソン注入モデル、モンテカルロ法<br>拡散方程式、ドーパント活性化モデル、結晶欠陥モデル<br>Deal-Grove モデル、拡散方程式、粘弾性方程式<br>デポジション速度入力、異方性、等方性<br>エッチング速度入力、異方性、等方性<br>簡易モデル<br>入力データで指定<br>並列コンピュータ対応の高速計算、3次元形状追跡法、<br>3次元自動メッシュ作成（4面体メッシュ） |
|--------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

表 3 デバイスシミュレータのおもな特長と機能

|       |                                                                                                                               |
|-------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 特徴    | 3次元高速解析（並列コンピュータ対応）<br>マスク利用により立体構造を容易に作成<br>3次元メッシュの自動生成<br>不純物のばらつき信頼性解析<br>パワーデバイスのフローティング電極のロバスト解析<br>CMOS ラッチアップの直接解析    |
| 物理モデル | 再結合モデル（SRH、オージェ、深い順位、界面順位）<br>キャリア生成モデル（衝突電離、雪崩増倍、GIDL モデル）<br>電解依存移動度モデル、パリスティック伝導モデル、絶縁体中の移動度モデル<br>量子効果（トンネル効果）、量子補正、ヘテロ接合 |

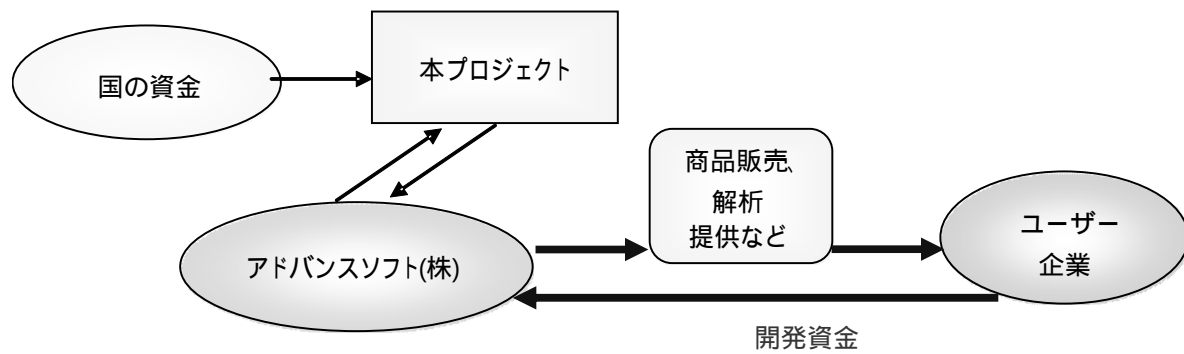


図 16 研究成果の事業化

### 参考文献

- [1] A. Abramo, et al, IEEE T-ED vol.41,  
p.1646, 1994
- [2] SILVAC 社 TCAD 資料
- [3] MMSPICE(SSE, vol. 33, pp. 1283-1291)