

Made in Japan の LSI 設計 CAD システム : Advance/TCAD

小池 秀耀*

LSI CAD System Made in Japan : Advance/TCAD

Hideaki Koike*

アドバンスソフト株式会社は科学技術振興機構の研究成果最適展開支援プログラム (A-STEP) の支援を受け、明治大学と共同で、LSI 設計用 CAD システム、Advance/TCAD を、平成 23 年から開発している。現在 β 版が完成し、一部の希望者に配布して評価していただいているところである。

Advance/TCAD は、現在の TCAD システムの対応が十分でないパワーデバイスと 30 ナノメートル以下の微細素子に焦点を当てた次世代 3 次元 TCAD システムである。並列コンピュータを用いた超高速計算も可能である。

LSI の発展に伴い、TCAD システムもより一層の高度化が必要とされているが、現在、TCAD システムは世界的にも 1 社が独占する状況にある。Advance/TCAD はこのような独占状態を打破り、より高度な TCAD システムを産業界に提供すべく開発されたシステムである。

Key word: 半導体、CAD システム、TCAD

1. はじめに

1.1. TCAD とは

TCAD とは、LSI 設計においてトランジスタなどの素子の電気特性や製造工程 (プロセス) を物理モデルに基づいてシミュレーションするソフトウェアである。電気特性のシミュレータをデバイスシミュレータと呼び、プロセスのシミュレータをプロセスシミュレータと呼ぶ。現在、TCAD は LSI の設計、研究開発に不可欠となっている。

1.2. TCAD 開発の歴史

最初の商業用 TCAD は TMA 社によるものである。スタンフォード大学のダットン教授が開発したプロセスシミュレータ (SUPREM、SUPREM3、SUPREM4) とデバイスシミュレータ (PISCES) をベースに、TMA 社は、TSUPREM4 と MEDICI をリリースした。これが 1979 年のことである。1989 年には、シルバコ・インターナショナル社がスタンフォード大の同シミュレータをベースに

プロセスシミュレータ ATHENA とデバイスシミュレータ ATLAS による TCAD を発表した。同年、スイスの ISE 社[2]はプロセスシミュレータ DIOS とデバイスシミュレータ DESSIS による TCAD の発表を行った。当初は 1 次元、プロセスシミュレータであったが、イオン注入、不純物拡散などの一連の半導体プロセスをシミュレーションできたこととシミュレーション結果が実際の LSI 設計に役に立ったことにより、半導体産業で広く使用されることになった。現在のプロセスシミュレータの主力は 2 次元シミュレータであるが、フロリダ大学で開発された 3 次元プロセスシミュレータ FLOOPS が ISE 社で商用化されている。

その後、TMA は 1998 年にアヴァンティ社に買収され、2001 年にアヴァンティ社はシノプシス社に買収された。ISE 社も 2004 年にシノプシス社に買収され、TCAD のシェアはシノプシス社が 90% 程度独占しているといわれている。

1.3. わが国の TCAD 開発

わが国でも 1980 年後半ごろは TCAD 開発が世界の最先端を走っていたが、結局、TMA やシノ

*アドバンスソフト株式会社 代表取締役会長

Representative director and chairman, AdvanceSoft Corporation

ブシス社などとの競争に負け、現在はわが国発の市販の TCAD は絶滅状態である。Advance/TCAD はこのような状況を打破しようとして国の支援の下、現在、開発中のソフトウェアである。以下、参考のためにこれまでのわが国の TCAD 開発の歴史について見てみる。

1.3.1. Si 半導体向けシミュレーションシステム HyENEXSS の開発

1980 年代後半は、わが国の半導体産業が繁栄していた時代であり、大手の半導体メーカー各社はみな独自の TCAD を開発していた。この時代は TCAD の開発においても、世界の最先端を走っていた。しかし、1990 年代に入ると TMA 社等の TCAD 専門業者が台頭し、半導体会社が独自の TCAD を開発し維持・メンテナンスすることが割に合わなくなってきた。このため大手半導体メーカーは共同で TCAD を開発することとした。Selete は日本の半導体産業復興のため日本国内の主要な半導体メーカー10 社が 1996 年 2 月に共同で設立した半導体技術共同開発会社である。会員企業から研究者・技術者が、産業総合研究所の一角にある同じ建物に集まって研究開発を進めた[1]。Selete の業務内容は 300mm ウェーハを用いる生産技術の開発、プロセスモジュール技術開発等であったが、その業務内容の一部に TCAD システム HyENEXSS の開発が含まれている。HyENEXSS は株式会社半導体先端テクノロジーズ(Selete) が 1996 年～2011 年に開発した、3 次元デバイス／プロセスシミュレータを中核とした、Si 半導体向けシミュレーション・システムである。HyENEXSS は 15 年の歳月とわが国の半導体メーカーの人材が結集し数十億円の開発費を投入して開発したソフトウェアである。その内容については、原則として Selete メンバーにしか公表されていないため、その詳細については不明である。公表されている資料をもとに推測すると HyENEXSS は以下のプログラム等から構成される[2]。

- ・ 3 次元プロセスシミュレータ : HySyProS
- ・ 3 次元デバイスシミュレータ : HyDeLEOS

- ・ 3 次元表示 : SGraph
- ・ データベース : HyPRADA
- ・ ネットワーク JOB システム : JobDB
- ・ インバースモデル解析ツール : invmdl

中核となるのは 3 次元プロセスシミュレータ : HySyProS と 3 次元デバイスシミュレータ : HyDeLEOS である。これらは市販のシノプシスの TCAD システムと同様にスタンフォード大学の SUPREM IV の流れを汲んでいる。最大の特徴は 3 次元シミュレーションに的を絞っているところである。HyENEXSS は一時期ベンチャー企業、株式会社 TCAD インターナショナル（現在は解散して存在しない）が販売していた。TCAD インターナショナルのパンフレットに記載されている TCAD システムは HyENEXSS と同じと考えられる。3 次元プロセスシミュレータの機能について次のように紹介されている。解析機能はイオン注入、不純物拡散、酸化膜成長、応力解析であり、これは市販の TCAD システムと同様である。3 次元デバイスシミュレータはミックスモード解析、キャリア生成、格子温度解析、モンテカルロ解析の機能を有している。

Selete は 2011 年 3 月に解散したため HyENEXSS は出資会社に配布されたようである。ただ今後の保守や開発・整備は不透明となっている。商用 TCAD として販売されてはいない。

1.3.2. 富士総合研究所の TCAD システム

1980 年代後半に筆者も富士総合研究所に在職中に TCAD システムを開発販売していたことがあった[3]。表 1 に富士総合研究所が開発販売していた TCAD システムを示す。当時は、国内では一定程度の販売を行っていたが、残念ながら TMA 社との競争に負けて姿を消した。

2. 科学技術振興機構の研究成果最適展開支援プログラム (A-STEP) とは

Advance/TCAD の開発にあたって支援を受けた JST の A-STEP について説明する。A-STEP は大学・公的研究機関等（以下、「大学等」という。

下記（注）参照）で生まれた国民経済上重要な科学技術に関する研究成果を基にした実用化を目指す研究開発フェーズを対象とした技術移転支援プログラムである。

大学等の研究成果からシーズ候補を企業の視点から掘り起こして、シーズとしての可能性を検証して顕在化させるフェーズという実用化に向けた研究開発の初期段階から、顕在化したシーズの実用性を検証する中期のフェーズ、さらには製品化に向けて実証試験を行うために企業主体で企業化開発を実施する後期のフェーズまで、それぞれの研究開発フェーズの特性に応じた複数の支援タイプにより実施しており、ステージⅠ、ステージⅡ、ステージⅢの3つのステージから構成されている。

3. Advance/TCAD の概要

3.1. はじめに

システム構成を図 2 に示す。デバイスシミュレータは標準的な流体モデルの 3 次元解析プログラムをベースとしているが、超微細素子とパワーデバイス用に改良されている。プロセスシミュレータで取り扱える工程は・イオン注入工程、・拡散工程、・酸化工程、・エッチング工程、・堆積工程である。統合プラットフォームは各シミュレータの GUI の機能と同時に TCAD システム全体の動作を制御し、各シミュレータを有機的に連携して操作することができる。さらに第一原理計算プログラム Advance/PHASE[5]を組み込んだ。

表 1 富士総合研究所の TCAD システム（1993 年現在）[3]

シミュレータの種類	シミュレータ名	目 的
素子設計総合シミュレータ	VEGA	●レイアウト・パターンから任意の断面の形状、不純物濃度分布、電気特性を一貫して求めることできる 2 次元総合シミュレータ ●ワークステーションを使用する CAD ツール
プロセス・シミュレータ	VS-P/B	●任意断面の不純物濃度分布を求める 2 次元プロセス・シミュレータ
	POLAR-2 D	●複雑な形状や酸化による形状の変化等を高精度の解析モデルを用いて詳細解析を行う 2 次元プロセス・シミュレータ
形状シミュレータ	VS-M/B	●半導体デバイスの 2 次元断面形状を作製プロセスに従ってシミュレートする
	F TREPTON	●3 次元光リソグラフィ・シミュレータ ●位相シフト法に対応できる ●2 次元光強度と 3 次元現象をシミュレート
プロセスの個別工程シミュレータ	BTE-2 D	●イオン注入を詳細に解析するためのシミュレータ ●2 次元 Boltzmann 方程式を解き、シリコン基板に打ち込まれたイオンの挙動を追跡する
	LASER-2 D/A	●レーザ・アニール法で半導体デバイスを作製する場合の温度分布の時間的変化を計算する 2 次元シミュレータ
デバイス・シミュレータ	VENUS-2 D/B	●連続体モデルによる 2 次元デバイス・シミュレータ ●半導体デバイスの電気特性を求める
	VENUS-3 D	●連続体モデルによる 3 次元デバイス・シミュレータ
	FEMTO-2 D	●粒子モデルによる 2 次元デバイス・シミュレータ ●モンテカルロ法を用い、半導体デバイス内の電子の挙動をシミュレートする ●半導体デバイスの電気特性を求める
パラメータ抽出プログラム	PARAM	●回路シミュレーションで必要となる素子モデル式のパラメータをデバイス・シミュレーションの結果より抽出する
回路シミュレータ	FCAP	●スーパーコンピュータ用の高速回路シミュレータ
LCR 計算プログラム	LCR-3 D	●LSI 回路のインダクタンス、配線容量、抵抗を計算する 3 次元シミュレータ

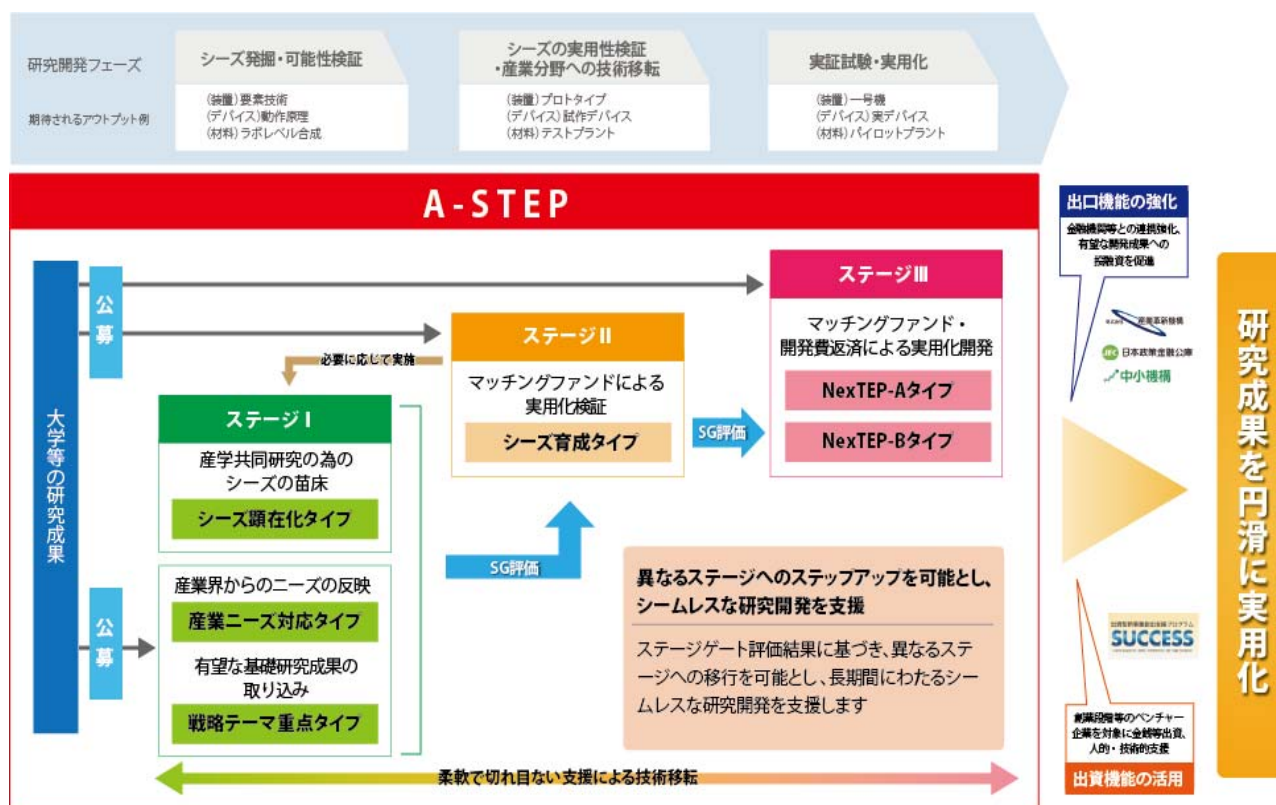


図 1 A-STEP の概要[4]

Advance/TCAD の新技術は以下の通りである。

①微細素子の解析機能の強化

- ・バリスティック輸送解析
- ・CMOS インバータの一括解析と複雑構造や複数トランジスタの一括解析（10 トランジスタ程度）
- ・3 次元解析（微細素子、パワーデバイスでは不可欠）

②パワーデバイスへの対応

- ・フローティング電極，高耐圧のロバスト解析
- ・デバイスの 3 次元形状近似の高度化

③第一原理計算との活用（材料探索など）

- ・ITRS の課題への挑戦

④計算技術

- ・並列コンピュータへの対応（MPI による分散並列）
- ・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

Advance/TCAD の特徴部分を既存の競合製品と比較すると表 2 のようになる。もちろんこの表には入っていない項目について競合製品が優つ

ている部分もある。

Advance/TCAD は汎用システムでありさまざまなデバイスの解析が可能である。図 3 に Advance/TCAD で解析可能なデバイスを示す。図 4 は Advance/TCAD の適用対象範囲である。

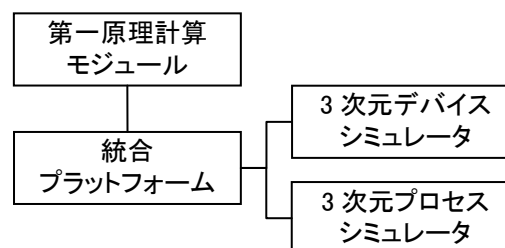


図 2 Advance/TCAD のシステム構成

3.2. 拡散

簡易拡散モデル（FERMI モデル）と 5 変数モデルを実装している。FERMI モデルは不純物原子の流束が濃度勾配に比例する項とイオン化した全不純物原子による電界項の和から構成されるモデルである。なお、FERMI モデルで使用する拡散係数等の値は SUPREM4 のものを利用している。

3.3. イオン注入

イオン注入機能として、3次元モンテカルロ法アルゴリズムを実装されている。任意のアモルファス材料、および結晶基板への注入計算が可能となった。また、それ以外に 4H-SiC などの六方晶系結晶基板への対応、並列化、分子注入の実装されている。1次元解析に基づく高速解析機能も実装されている。

図 6 は六角トレンチ構造の 4 分の 1 部分への斜

めイオン注入計算の結果である。左側の図は全体の鳥瞰図、右側上手は xy 平面、右側下図は zx 平面で切り取った図。注入条件は、モンテカルロ粒子数 400 万個、注入イオン ホウ素、注入エネルギー 5keV、注入ドーズ量 1015/, Tilt 角 50°, Rotation 角を 60°, 150°, 240°, 330° の 4 方向とした。

図 7 は SiC の 6 方晶へのイオン注入の結果である。

表 2 Advance/TCAD (本製品) の特徴項目について、競合製品との比較

○：相対的に優れている。

△：相対的に劣っている。

×：機能がないか、実用的とはいえない。

シミュレータ	機能	本製品	競合製品	備考
デバイスシミュレータ	バリスティック輸送解析	○	△	計算速度に大きな差。3 倍以上速い。
	CMOS インバータの一括解析	○	×	既存ソフトは解析不可
	3次元解析	○	△	ロバスト性、計算速度に差。特に分散並列処理で優位
	並列コンピュータへの対応	○	△	既存ソフトは分散並列に対応できない。大規模並列計算はできない。
	3次元形状追跡、3次元自動メッシュ	○	△	本製品は独自のアルゴリズムを開発しており。精度、ロバスト性で差がある。
	大規模計算の高速化	○	△	並列化などのより計算速度に大きな差。競合製品は 1000 万格子程度の大規模解析はできない。
	フローティング電極のロバスト解析	○	×	本製品はワイドギャップ半導体の再結合モデルを (②順位モデル) を実装し、フローティング電極の解析を可能とした。既存ソフトには機能なし
	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	○	×	本製品は 10 トランジスタ以上の一括解析ができる。競合製品は実用的でない。
プロセスシミュレータ	イオン注入	○	△	本製品のモンテカルロ計算は並列化されており、大規模解析に関しては競合製品より数十倍以上高速。
	不純物拡散	○	○	本製品には 5 変数モデルが実装されている。並列計算により高速。 競合製品は実績の点で先行している。
	酸化	○	△	競合製品の 3 次元の酸化計算 (粘弾性) は実用的ではない。
	堆積・エッチング	○	×	本製品は 3 次元の複雑な形状の堆積・エッチングが解析できる。競合製品は複雑な形状に対して実用的でない。

3D-TCAD 適用対象課題

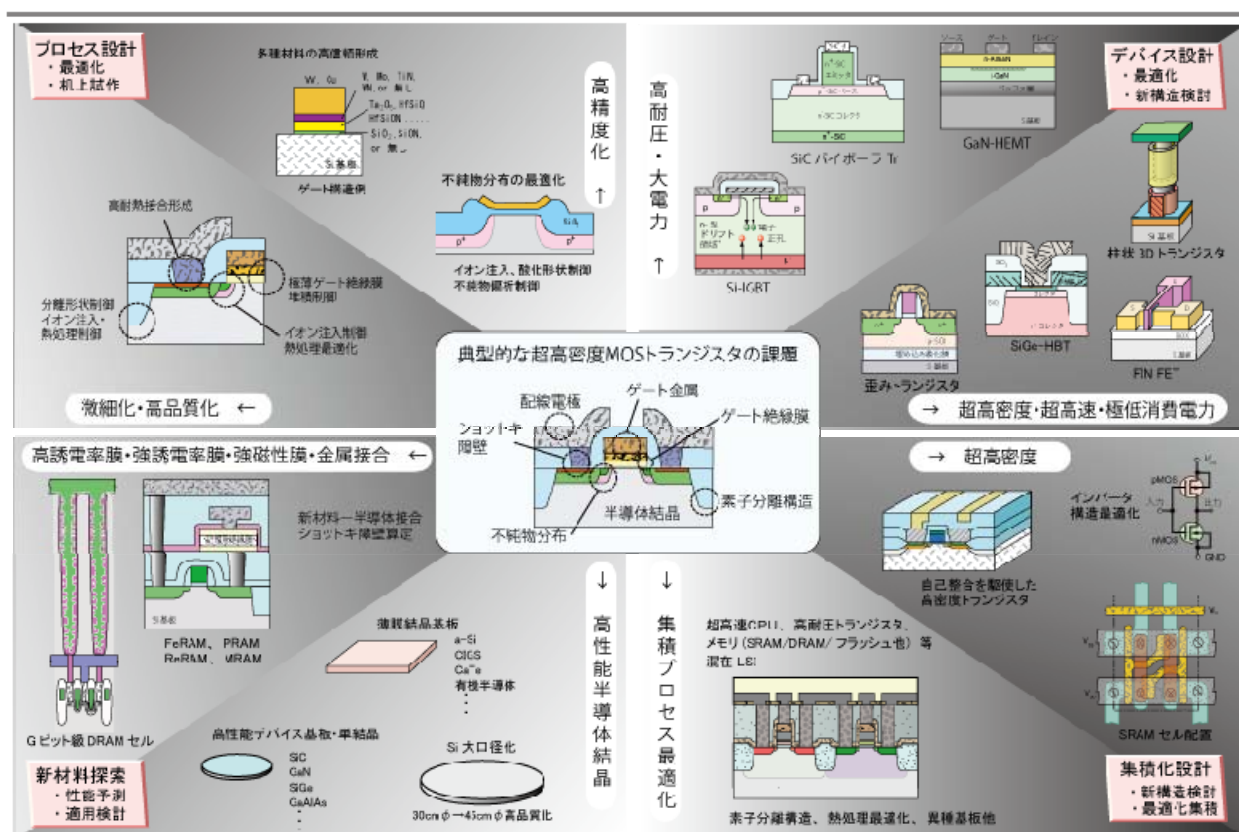


図 3 Advance/TCAD の解析対象

3D-TCAD 適用対象範囲

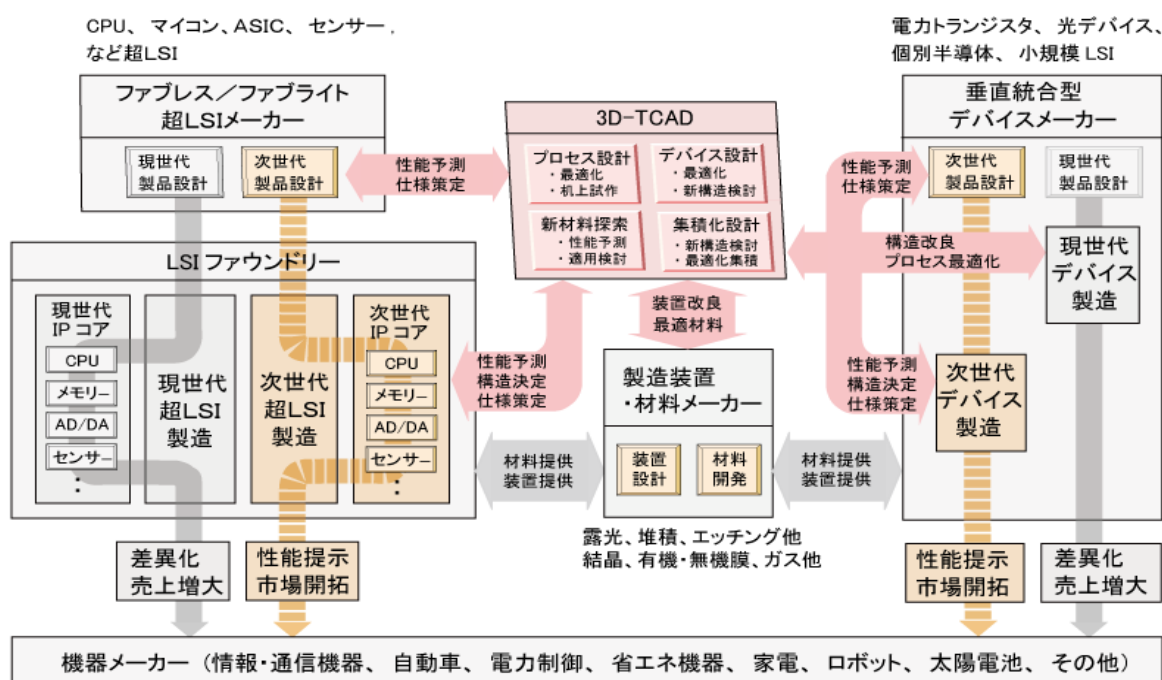


図 4 Advance/TCAD の適用範囲

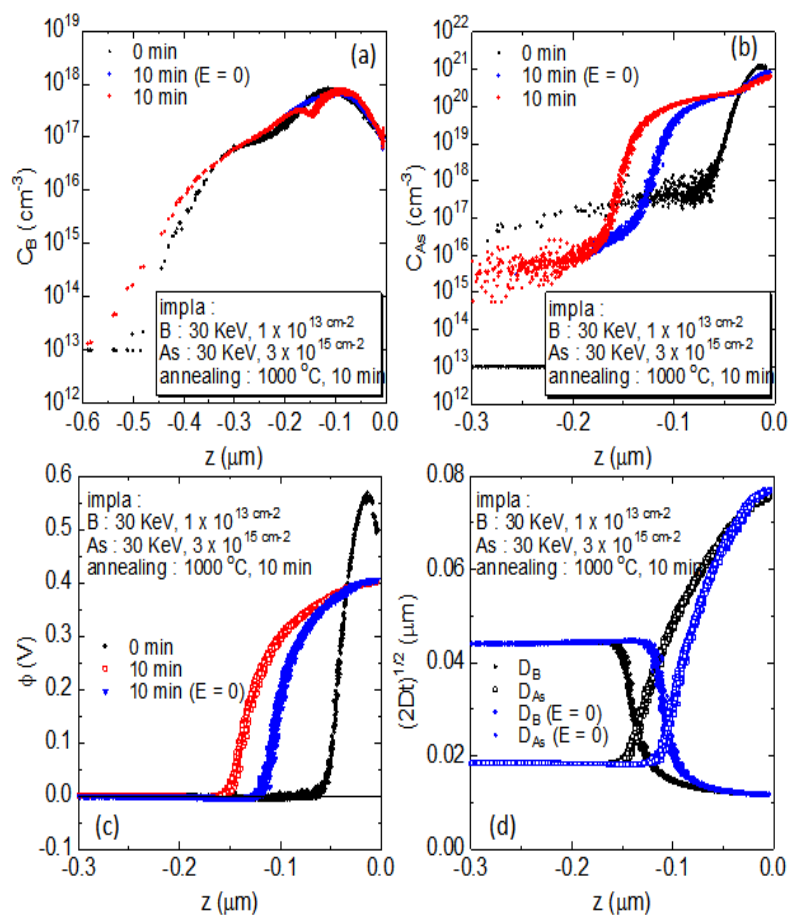


図 5 FERMI モデル の結果 (FERMI モデルを用いた場合の濃度分布、電界分布がゼロ ($E=0$) の場合、拡散の初期分布はイオン注入計算の結果)

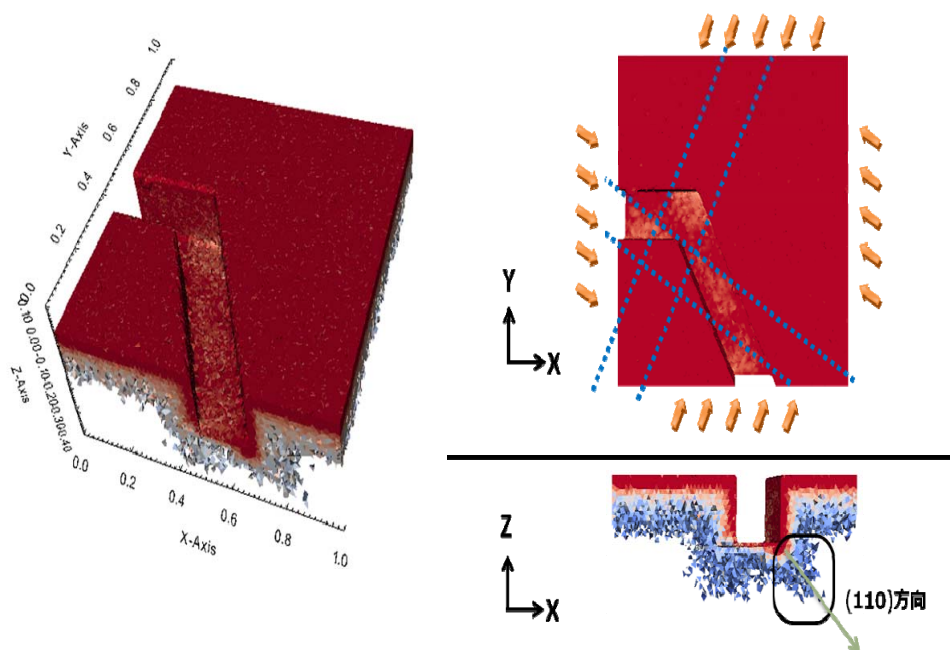


図 6 3次元形状へのイオン注入シミュレーションの結果

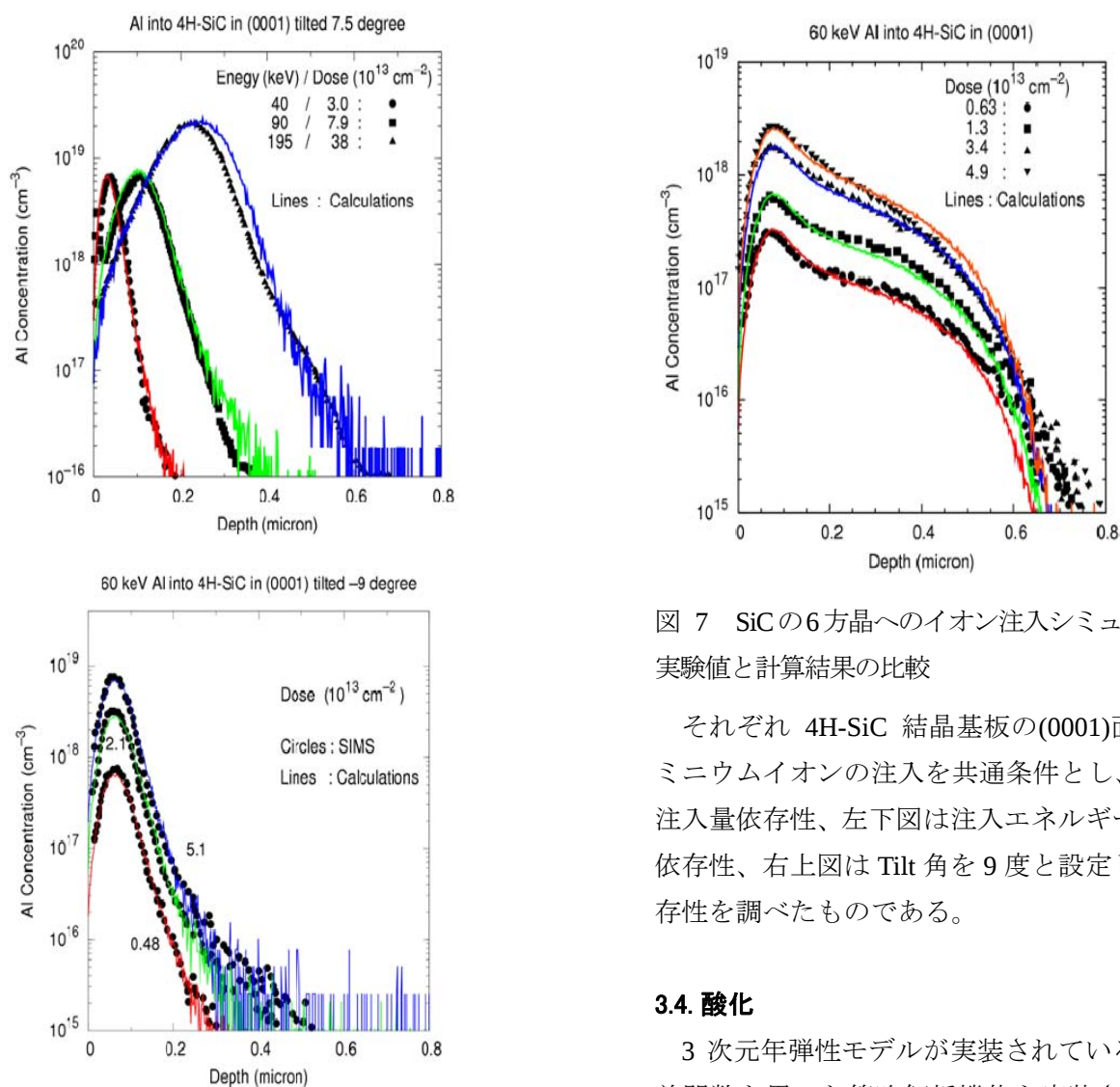


図 7 SiC の 6 方晶へのイオン注入シミュレーション
実験値と計算結果の比較

それぞれ 4H-SiC 結晶基板の(0001)面へのアルミニウムイオンの注入を共通条件とし、左上図は注入量依存性、左下図は注入エネルギーと注入量依存性、右上図は Tilt 角を 9 度と設定し注入量依存性を調べたものである。

3.4. 酸化

3 次元弾性モデルが実装されている。また誤差関数を用いた簡略解析機能も実装されている。図 9 は酸化シミュレーション結果である。

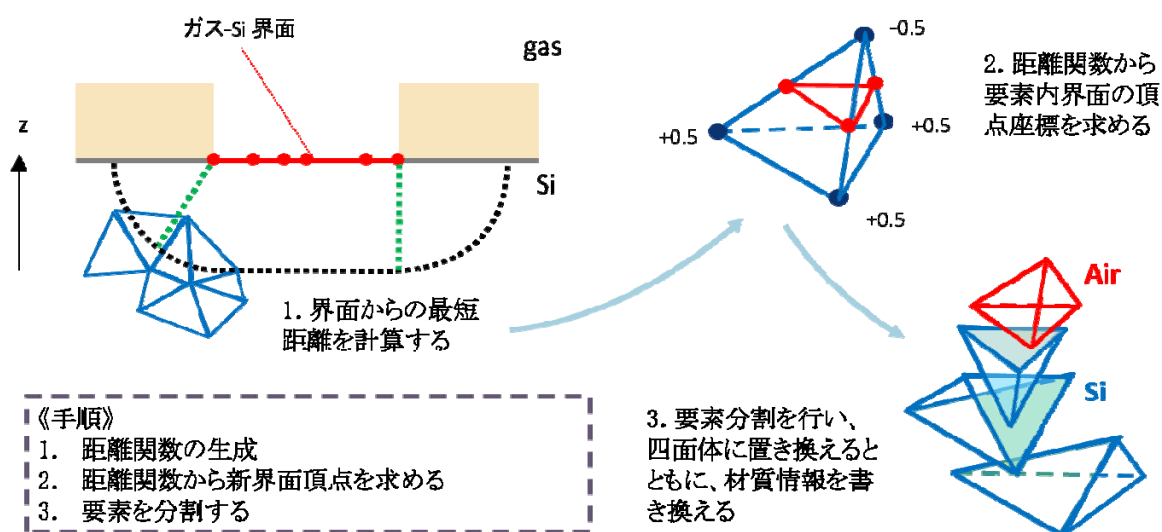
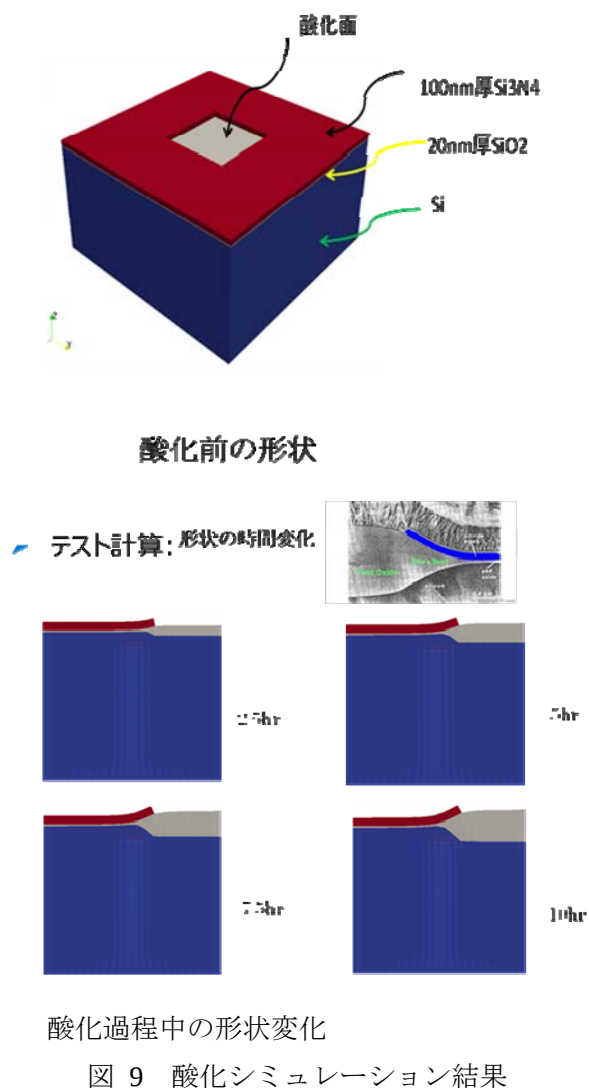


図 8 3 次元形状追跡アルゴリズムの概要



3.5. 堆積とエッチング

形状追跡の解析手法を選定した。3次元形状追跡プログラムでは「距離関数」による界面移動方法を用いる。界面の追跡だけでなく3次元的な領域の追跡を同時に行うことに注目することで、より頑健で高速なアルゴリズムの開発に成功した(図8参照)。新界面の生成後に要素分割を行うため、解析領域を限定して処理を行うことができ、全体メッシュ再生成を行うよりも非常に高速である。

3.6. デバイスシミュレータ

Advance/TCADの特徴はデバイスシミュレータの先端性にある。デバイスシミュレータの特徴は以下の通りである。[6],[7]

- ①バリスティック輸送解析で、現状の3倍以上の高速計算手法を確立し、バリスティック輸送解

析の実用化を実現した。

- ②従来は解析できなかったワイドギャップ半導体(例えばSiC)のフローティング電極解析手法を確立し、パワーデバイスの解析を実用化した。
- ③従来はできなかったCMOSの一括解析手法を確立した。複数トランジスタの一括解析を実現した。

図10にSiCダイオードのシミュレーション結果を示す。図11はCMOSインバータの電流—電圧特性である。

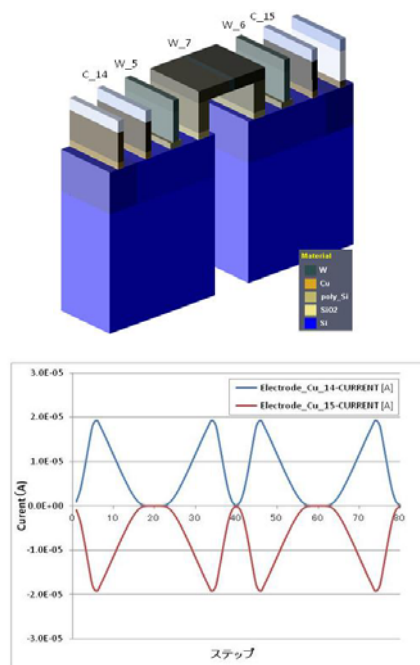
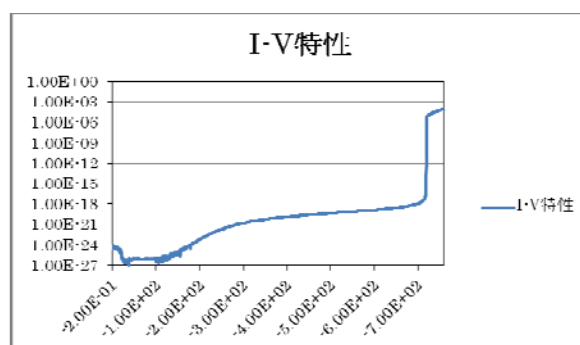


図12にAdvance/TCADによるプロセス・デバイス一貫解析の結果を示す。微細MOSとIGBTの解析結果を示す。

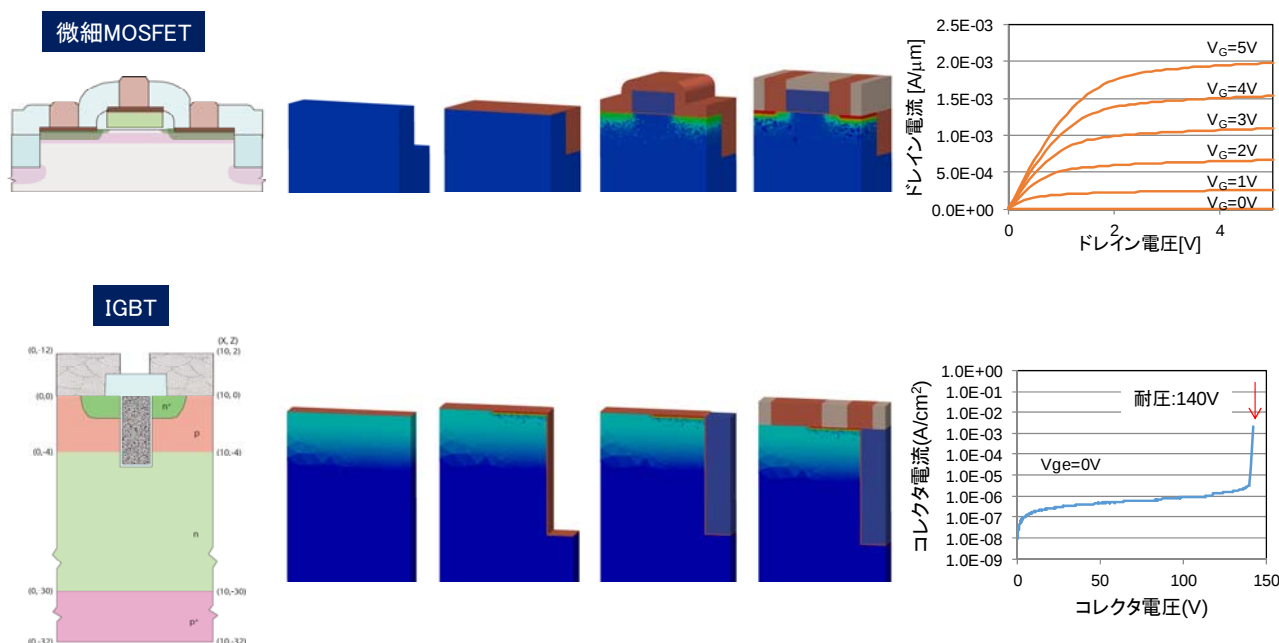


図 12 Advance/TCAD によるプロセス・デバイス一貫解析

Advance/TCAD は MPI を用いた本格的な分散並列計算ができる。これにより、3 次元計算や大規模解析が 1/10 以下の計算時間で実行可能である。図 13 はモンテカルロ・イオン注入計算を並列化した計算結果である。48 並列で 39 倍に高速化されている。図 14 にデバイスシミュレータの並列化の結果を示す。

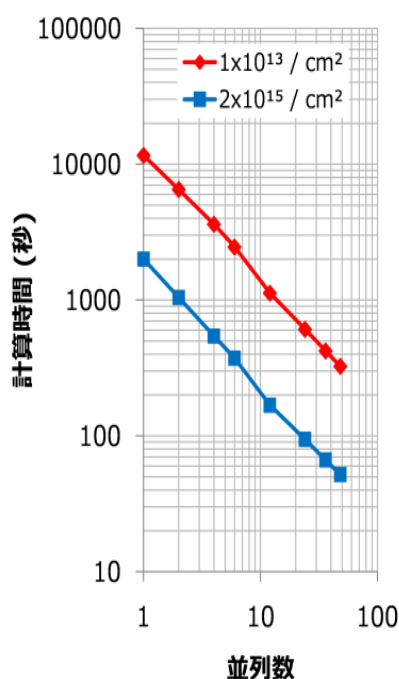


図 13 イオン注入の並列計算 (48 並列で 39 倍の高速化)

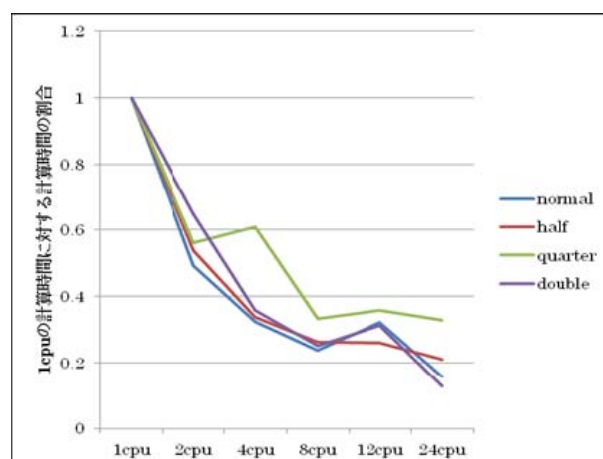


図 14 デバイスシミュレーション。格子数による変化。Normal : 120 万格子数。

参考文献

- [1] 一般財団法人 武田計測先端知財団：“半導体先端テクノロジーズ(Selete)”
- [2] 石川清志：“次世代 TCAD プラットフォーム開発”，2001
- [3] 富士総合研究所編 半導体素子設計シミュレータ，丸善，1988
- [4] 国立研究開発法人 科学技術振興機構
(<http://www.jst.go.jp/a-step/outline/index.html>)
より引用
- [5] 西原 慧径，岡崎 一行，“第一原理計算ソフトウェア Advance/PHASE”，アドバンスシミュレーション

ュレーション Vol.20, 2014.12

- [6] Ken Yamaguchi, Shogo Sakurai and Kazutaka Tomizawa, Japan. J. Appl. Phys., vol. 49, (2010) 024303
- [7] Ken Yamaguchi, Takuhito Kuwabara, and Tsuyoshi Uda, J. Appl. Phys, 113, 104506 (2013), published online 14 March 2013

謝辞

本研究は国立研究開発法人 科学技術振興機構 A-STEP プログラムの助成を受けて行われた。

※ 技術情報誌アドバンスシミュレーションは、アドバンスソフト株式会社 ホームページのシミュレーション図書館から、PDF ファイルがダウンロードできます。(ダウンロードしていただくには、アドバンス/シミュレーションフォーラム会員登録が必要です。)