

大規模3次元TCADシステム Advance/TCAD

原田 昌紀** 大倉 康幸** 桑原 匠史** 萩原 敦**
 島田 昭男** 徳屋 純一** 山口 憲* 小池 秀耀***

Large Scale Three-Dimensional TCAD System: Advance/TCAD

Masanori Harada **, Yasuyuki Ohkura **, Takuhito Kuwabara **, Atsushi Hagiwara **,
 Akio Shimada **, Junichi Tokuya **, Ken Yamaguchi * and Hideaki Koike ***

Advance/TCAD は超微細半導体デバイスからパワーデバイスまでの解析において、複数デバイスの一体解析（セルレベルシミュレーション）やデバイス・外部回路（LCR）一体解析（Advanced mixed-modes）等の高度な機能と使いやすい GUI を備えた 3 次元 TCAD システムである。

Key word: 半導体、プロセスシミュレータ、デバイスシミュレータ、3 次元、不純物拡散、非平衡反応拡散モデル、イオン注入、モンテカルロ法、堆積/エッチング、距離関数法、酸化、CMOS、インバータ、強連成、一括解析、過渡解析、パワーデバイス、SiC、GaN、ショットキー、バイアス粗密調整、高耐圧計算

1. 概要

1.1. システム構成

Advance/TCAD は独自に開発した高速で安定的な計算手法や分散メモリ型並列計算機能の採用などにより高速でロバストな大規模 3 次元プロセス・デバイス計算を特徴としている。また、各種の物性値や計算パラメータはユーザーにより任意の値が設定可能であるため、研究から製造までの幅広い用途での使用が可能である。超微細デバイス、パワーデバイスのそれぞれの解析に特有な解析機能を備えている。

Advance/TCAD システムはプロセスシミュレータ、デバイスシミュレータおよび統合プラットフォームから構成される。統合プラットフォームに

*アドバンスソフト株式会社 総合企画部

General Planning Division, AdvanceSoft Corporation

**アドバンスソフト株式会社 第 1 事業部

1st Computational Science and Engineering Group,
 AdvanceSoft Corporation

***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

は、プロセスシミュレーションから得られた形状および不純物分布データをデバイスシミュレーション用の異なるメッシュ系へ変換するコンバータの機能も含んでいる。以上の全機能を統合プラットフォームの GUI で統合的に制御している。

1.2. プロセスシミュレータの特徴

プロセスシミュレータはメッシュ生成、形状生成、イオン注入、酸化、拡散の 3 次元解析機能を搭載している。対象材料は Si と SiC である。主な特徴を以下に挙げる。

- 格子密度制御機能付き非構造四面体メッシュャーを搭載しており、複雑な構造を高精度にシミュレート可能である。
- 幾何学的な処理による高速な形状生成機能によりデポジションとエッチングをシミュレーションする。
- 結晶材料（立方晶、六方晶）とアモルファス材料の両方に対応した 3 次元モンテカルロ法によるイオン注入シミュレーションが可能である。

- 実験もしくはシミュレーションにより得られる 1 次元不純物分布データから畳み込み積分法により 3 次元分布を生成する簡易不純物設定機能も搭載している。
- 拡散機能には非平衡反応拡散モデルと平衡拡散モデルを採用している。
- 粘弾性モデルによる 3 次元酸化解析機能を搭載している。LOCOS 構造の酸化にも対応している。

1.3. デバイスシミュレータの特徴

デバイスシミュレータは、3 次元デバイスの直流・過渡特性の解析が可能であり、複数デバイスおよび外部回路も含めた大規模計算にも対応している。対象材料として Si および化合物系に対応している。主な特徴を以下に挙げる。

- 定常解析および過渡解析に対応している。過渡解析では時間刻み幅の自動制御、任意入力波形の設定を可能としている。
- バリスティック伝導に対する高精度・高速解析手法を搭載している。
- シリコンをはじめワイドギャップ半導体 (SiC 系、GaN 系) の物性値を装備している。任意の物性値設定による新材料探索も可能である。
- ワイドギャップ半導体 (~ 3eV) における安定計算手法 (二準位間遷移再結合モデル) により超低電流でも安定である。
- GaN 系デバイスでみられる電流コラプスの原因となる深い準位や SiC デバイスにおけるやや深い準位のイオン化率の変化をシミュレートする一準位再結合モデルを定常・過渡解析に採用している。
- 高速高電圧解析のためのバイアス粗密調整機能やガードリング (浮遊電位解析) のための仮想ライフタイム法等、独自に開発した高速・安定収束化技術を搭載している。
- 界面における連続準位を複数種類設定可能 (マルチ指数関数モデル) である。
- ショットキー接合にはドリフト・拡散モデルに加えトンネル電流モデルを採用している。

- 複数デバイス一括解析 (インバータチェーン、リングオシレータ等の一括解析) が可能。
- モータ負荷やサージ電流解析 (ESD) に対応する外部 LCR 回路を含めた強連成一括計算手法 (Advanced mixed-modes) を搭載している。なお SPICE と同様の回路の記述方式を採用している。
- 領域分割並列計算 (Linux 版) による大規模高速計算が可能である。
- ガンメル法とカップル法搭載により多様な課題に対応している。
- パワーデバイス特有の円形やトラック形状に対応した円形メッシュ機能を搭載している。
- スーパーコンピュータでの計算に対応している。

以降、2 章ではプロセスシミュレータについて、3 章ではデバイスシミュレータについて詳細に説明する。4 章では Advance/TCAD の特徴である大規模解析について説明する。さらに詳細な内容についてはアドバンスシミュレーション Vol.21 (2015.9) [21]で説明されている (※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 (カラー版) がダウンロードできます)。

2. プロセスシミュレータ

2.1. はじめに

Advance/TCAD プロセスシミュレータでは、堆積工程、エッチング工程、イオン注入工程、拡散工程、酸化工程が扱える。Advance/TCAD のプロセスシミュレータの特徴は次の点にある。

- ① 3 次元プロセスシミュレータである。既存の商用製品での主流である 2 次元プロセスシミュレータに比べて複雑な 3 次元形状処理のアルゴリズムを搭載しており、堆積、エッチングの 3 次元処理が可能である。
- ② MPI を用いた分散並列計算が可能である。3 次元シミュレーションでは数百万から数千万の

格子の大規模解析と高速計算を実現する必要がある。Advance/TCAD では MPI を用いた大規模（数百 MPU 以上）な分散並列計算により、数千万から 1 億格子の計算が可能である。

- ③ イオン注入シミュレーションは高速なモンテカルロ計算を中心として高精度な機能を有している。

以降では、堆積・エッチング工程のための形状変形モデルおよびイオン注入機能を中心に Advance/TCAD プロセスシミュレータ機能と事例を紹介する。

2.2. 形状変形モデル

2.2.1. 概要

半導体デバイス製造工程を計算機上でシミュレートするためには、工程の段階に応じたデバイス形状の変形を計算する機能が必須である。Advance/TCAD プロセスシミュレータでは大規模計算での利用を見据え、比較的計算コストの少ない幾何学的手法による形状変形計算を採用している。具体的には以下の手順を繰り返すことで実現される。

- A) ガス界面やマスクエッジからの距離を元に格子点の距離関数を求める
- B) 要素の距離関数値に応じて新たな界面の格子点を求める
- C) 新たな格子点を用いて要素の分割を行う
- D) 材質情報の変換が必要な要素に対しては、その情報を書き換える

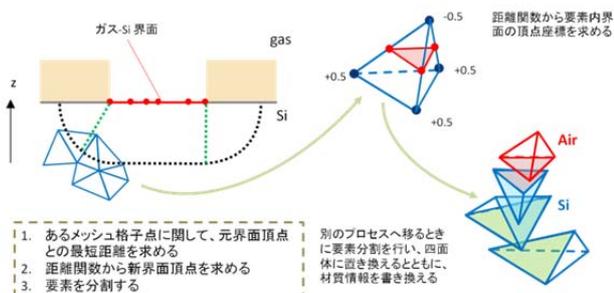


図 1 モデルの概要

2.2.2. 距離関数法

Advance/TCAD プロセスシミュレータの形状変

形計算では、新たに考案した幾何学的な計算モデル（本書では距離関数法モデルと呼ぶ）を用いている。距離関数は、形状変形後のガスと材質の界面の上では値がゼロであり、その他の点では界面からの符号付き距離となる量である。符号は界面を境に、材質の転換が発生する領域では負、発生しない領域では正と定義される。例えば図 2 左のようにすでに存在している材質 A（図の塗りつぶし領域）の上に、図 2 右のように材質 B（図の斜線領域）をある厚さだけデポジションさせることを考える場合、図 2 中央の破線が距離関数値ゼロの点の集合である。また、図 2 右の斜線や塗りつぶした領域にある点は距離関数が負値に、白色の領域にある点では正值となる。

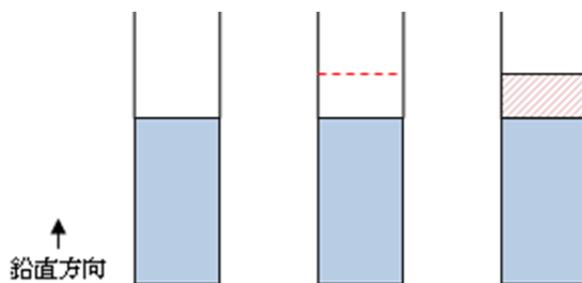


図 2 距離関数

解析領域内の各点の距離関数値が求めればその情報を元に材質変換を行い、新たな界面を構成することができる。シミュレーションでは解析領域を離散的な要素に分割して計算するが、1 つの要素に属する節点での距離関数値に応じて、その要素の変換を行うことが基本的な考え方となる。具体的には要素に属する全ての節点の距離関数値が負であれば、その要素の領域は全て変換されることになり（図 3 の白抜きの三角形）、また、正值と負値の両方を持っていれば要素内に界面が形成されることになる（同図の斜線の入った三角形）。要素内に界面が形成される場合には元の要素を界面で分割し、片方の材質を変換する。界面の位置は節点の距離関数値を用いた内挿で求めることができる。

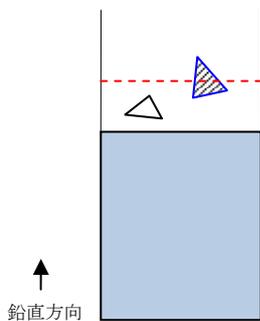


図 3 要素の変換：破線は距離関数値がゼロの点集合

2.2.3. デポジションとエッチングのモデル

Advance/TCAD プロセスシミュレータの形状変形モデルで扱える形状変形には大きく分けてデポジションとエッチングの2つの工程がある。デポジションでは等方性モデルと平坦化モデルを考える。等方性モデルは界面から厚さが一定の堆積を行うモデルである。エピタキシャル成長のように、ある特定の材質とガスとの界面に限定して堆積を行わせることもできる。また鉛直方向の堆積と水平方向の堆積とで厚みが変わる場合にも対応している。平坦化モデルは界面形状とは無関係に、解析領域のある高さまで材料を堆積させるモデルである。

エッチングには等方性モデル、異方性モデル、平坦化モデルが存在している。等方性モデルは界面から一定の厚さまで材質を削るモデルである。ある特定の材質だけを削ることも可能である。また等方性デポジション同様、鉛直方向と水平方向とで削られる量が変わる場合も対応している。異方性モデルは界面から鉛直方向に一定の厚さだけ削るモデルである。平坦化モデルは、化学機械研磨のように界面形状とは無関係に解析領域のある高さまで削るモデルである。

なお、利便性のため、ガスに接している特定の材質を取り除く除去操作も用意する。この操作は距離関数を計算することなく処理できる。

(1) 等方性デポジションモデル

デポジションの等方性モデルは界面からの距

離が一定の所まで堆積させるモデルである。対象材質の指定やマスクの使用も可能である。

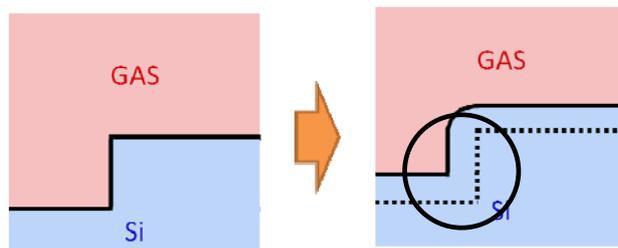


図 4 等方性デポジションのイメージ図

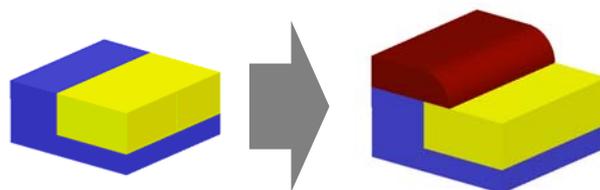


図 5 対象材質を指定した等方性デポジションの例

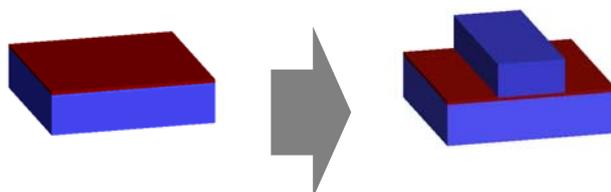


図 6 マスク指定がある場合の等方性デポジションの例

(a) RATIO=1.0

(b) RATIO=0.5

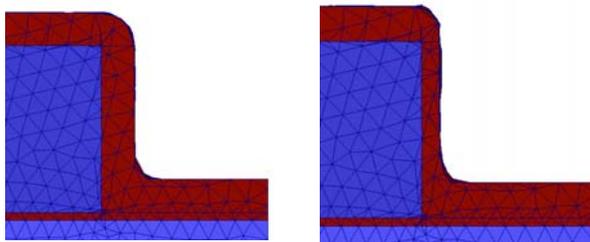


図 7 異方化率の違いによる等方性デポジションの違いのイメージ図

(2) 平坦化デポジションモデル

デポジションの平坦化モデルは解析座標系のある z 座標値まで、もしくは、ガス相の最下点を

基準とした厚み指定で堆積させるモデルである。平坦化デポジションではマスクは利用できない。

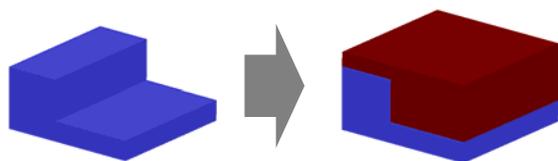


図 8 平坦化デポジションの例

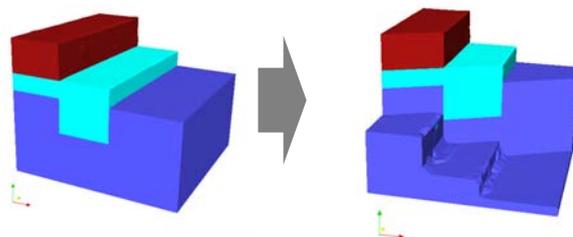


図 11 異方性エッチングの例 (その 2)

(3) 等方性エッチングモデル

エッチングの等方性モデルは界面から一定の厚さまで材質を削るモデルである。対象材質の指定やマスクの使用も可能である。

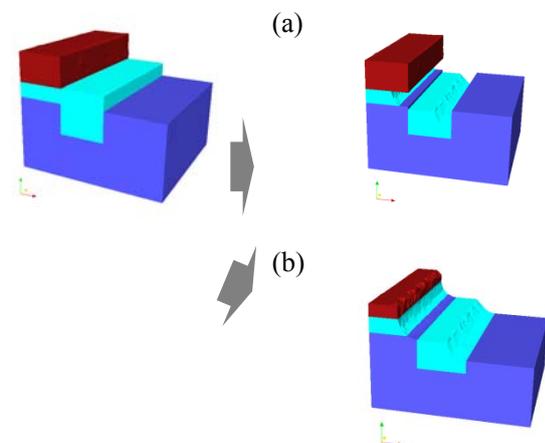


図 9 等方性エッチングの例

(a)対象材質を 1 つ指定

(b)全ての材質を対象として指定

(4) 異方性エッチングモデル

エッチングの異方性モデルは界面から鉛直方向に一定の厚さだけ削るモデルである。マスクの使用が可能である。

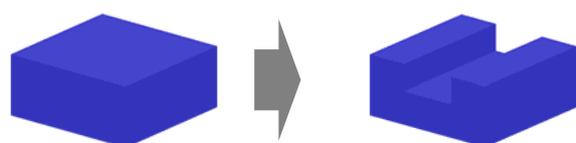


図 10 異方性エッチングの例 (その 1)

(5) 平坦化エッチングモデル

エッチングの平坦化モデルはデポジションの場合と同様に、解析座標系のある z 座標値まで、もしくは、ガス相の最下点を基準とした厚み指定で削るモデルである。平坦化エッチングではマスクは利用できない。

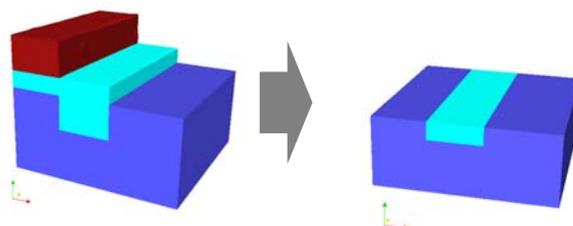


図 12 平坦化エッチングの例

(6) 除去モデル

除去は距離関数を計算することなく処理できる操作である。ガスに接している対象材質要素および、その要素に連結している全ての対象材質要素全体をガスに転換させるように処理する。

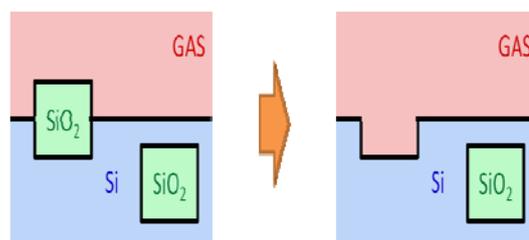


図 13 除去操作のイメージ図

2.3. イオン注入機能

2.3.1. 概要

Advance/TCAD のイオン注入シミュレータとしてモンテカルロ法を採用している。モンテカルロ

法では、注入したイオンと材質を構成している原子の相互作用を逐次計算しイオンの停止位置を算出する。相互作用によるエネルギー損失は、材質を構成する原子を取り囲む電子との相互作用による損失(電子阻止能)と、材質構成原子との直接衝突による損失(核阻止能)に分けられる。Advance/TCAD では、核阻止能モデルとして3次元2体衝突近似を基に原子間相互作用としてZBLポテンシャル[1]、電子阻止能モデルとしてLSS[2]、Firsov[3]、VIENNA[4]モデルを採用した。

また、高ドーズ量イオン注入において、結晶の破壊によるチャネリング現象の抑制の顕著化が知られている。この効果を取り入れるために、Kinchin-Peace モデル[5]と確率的結晶破損率を導入した。

2.3.2. 核阻止能モデル

核阻止能におけるイオンと原子の相互作用は2体衝突の積み重ねとして近似して扱われる。2体衝突による散乱およびそれに伴う核阻止能を計算するためには、衝突ターゲット原子の位置を正確に探索する必要がある。

結晶材質に対しては、入射したイオンの現在位置情報を基に、必要な周期分の結晶を発生させる。

アモルファス材質に対しては、次の衝突までに直進する距離を材料の原子数密度から求まる平均自由行程距離とし、衝突半径については原子数密度と乱数を用いて求めている。

2.3.3. 電子阻止能モデル

● Firsov モデル

低速の入射イオンが衝突標的原子と衝突した際に、電子の運動量を交換することによって入射イオンは減速する。Firsov モデルではこの現象に基づき提案されたものである。エネルギーE、質量数 M_1 、原子番号 Z_1 のイオンが原子濃度数 N_t 、原子番号 Z_2 の原子で構成されている材質構成原子との衝突の際の電子によるエネルギー損失は式(45)のように表される。 C_{Fir} はパラメーターである。

$$\Delta E = C_{Fir} \frac{0.05973(Z_1 + Z_2)^{7/3}}{(1 + 0.31(Z_1 + Z_2)^{1/3} r_{min})^5} \sqrt{\frac{E}{M_1}} \quad (1)$$

● LSS モデル

このモデルは、Firsov モデル同様、低速の注入イオンを対象に提案された。Thomas-Fermi モデルでは、原子を原子核の電荷のもとに束縛された電子雲とみなす。その電子雲中を入射イオンが通過する際にそれら電子と非弾性散乱を行う、という考えに基づいている。エネルギーE、質量数 M_1 、原子番号 Z_1 のイオンが原子濃度数 N_t 、原子番号 Z_2 の原子で構成されている物質中を距離 Λ だけ飛行、進入した際のエネルギー損失は式(46)および(47)のように表される。 C_{LSS} はパラメーターである。

$$\Delta E = N_t \Lambda S_e \quad (2)$$

$$S_e = C_{LSS} \frac{1.212Z_1^{7/6} Z_2}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{3/2}} \sqrt{\frac{E}{M_1}} \quad (3)$$

● VIENNA モデル

このモデルは、チャネリング分布のシリコン結晶面方位依存性が良く合うように、調整された経験モデルである。より多くのパラメーターが必要となるが、Si 基板の(110) 面へのイオン注入計算などで実験値との良い一致を示すことが知られている。エネルギー損失は式(48)~(50)として表される。

$$\Delta E = \Delta E_{loc} + \Delta E_{non-loc} \quad (4)$$

$$\Delta E_{loc} = x_{loc} \frac{S_e}{2\pi a_{OEN}^2} \exp\left(-\frac{p_{cut}}{a_{OEN}}\right) \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \Delta E_{non-loc} = N_t \Lambda S_e \left[(1 - x_{loc}) \right. \\ \left. + x_{loc} \left(1 + \frac{p_{cut}}{a_{OEN}} \right) \exp\left(-\frac{p_{cut}}{a_{OEN}}\right) \right] \quad (6) \end{aligned}$$

式(49), (50)に含まれる a_{OEN} は Oen-Robinson 遮蔽長であり、式(51)として定義される。

$$a_{OEN} = \frac{fa}{0.3Z_1^b} \quad (7)$$

ここに含まれる f, b および、式(49), (50)に含まれ

る x_{loc} , p_{cut} はパラメーターである。また、式(49), (50)における S_c は式(46)の LSS モデルにおけるエネルギー損失と同じである。

2.3.4. 結晶熱振動モデル

結晶原子の熱振動による変位をデバイ模型で取り扱い、結晶平均位置からの標準偏差として取り入れている。デバイ模型における熱振動振幅は式(52)として表される。

$$\langle r^2 \rangle_{RMS} = \sqrt{\frac{3\hbar^2}{Mk_B\theta} \left[\frac{1}{4} + \frac{T}{\theta} \phi\left(\frac{\theta}{T}\right) \right]} \quad (8)$$

ここで、 ϕ はデバイ関数であり、式(53)として定義される。

$$\phi(\xi) = \frac{1}{\xi} \int_0^\xi \frac{t}{\exp(t) - 1} dt \quad (9)$$

2.3.5. 結晶破壊モデル

高ドーズ注入における結晶破壊は、衝突時の核阻止エネルギー損失によるものである。これらの現象を、カスケード破壊として経験的に調整したものが Kinchin-Peace モデルである。材質構成原子の原子番号を Z , 質量数を M とした際の、1 回の 2 体散乱における点欠陥生成エネルギーおよび点欠陥発生個数は式(54)のように表される。

$$G_{defect} = \begin{cases} 0 & \text{for } E_V < E_D \\ 1 & \text{for } E_D \leq E_V < 2.5E_D \\ \frac{0.8E_V}{2E_D} & \text{for } 2.5E_D \leq E_V \end{cases} \quad (10)$$

$$E_V = \Delta E / \left\{ 1 + Z^{\frac{2}{3}} M^{-\frac{1}{2}} \left(E_D + \alpha E_D^{\frac{3}{4}} + \beta E_D^{\frac{1}{6}} \right) \right\} \quad (11)$$

$$\alpha = 0.40244, \quad \beta = 3.4008$$

$$E_D = 0.01014Z^{-7/3} \Delta E \quad (12)$$

Kinchin-Peace モデルで計算された結晶破壊量は各解析要素の確率的結晶欠陥率として保持され、チャネリング阻止力として計算に寄与する。確率的結晶欠陥率は式(57)とし表される。

$$R_{defect}^{new} = R_{defect}^{old} + C_{AMR} G_{defect} \frac{(1 - R_{defect}^{old})}{V * N} w \quad (13)$$

ここで、 R_{defect}^{old} は更新前の結晶欠陥率、 R_{defect}^{new} は更新後の結晶欠陥率、 C_{AMR} は調整パラメーター、 w はモンテカルロ粒子の重み、 V は各要素体積、 N は材質構成原子の数密度を表している。

2.3.6. 検証計算

検証計算として、(1)項では Si 基板を、(2)項では 4H-SiC 基板を対象にしたイオン注入実験との比較結果を示す。ここで、それらのシミュレーションにおいて、パラメーター値は全て同じであることに留意されたい。(3)項では、3 次元構造への適用事例として、4H-SiC 基板の n 型 MOSFET と Si 基板の六角トレンチの結果を示す。

(1) si 基板へのイオン注入

図 14 に Si 基板に低エネルギー (0.5, 1, 2keV) の B イオンを注入する場合のエネルギー依存性の結果を示す。ティルト角 0° における Si 結晶内のチャネリングの効果やティルト角を 7° とした場合の注入方向がチャネリング軸から外れたことによる基板深部への進入のし難さを再現できていることが分かる。

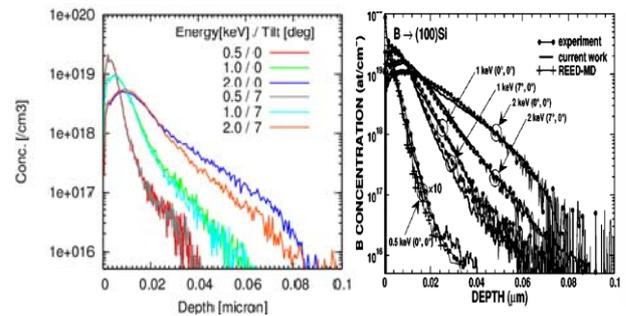


図 14 Si 基板(100)面への低エネルギーB イオン注入におけるエネルギー依存性 (左図は Advance/TCAD、右図は実験[6]による結果。ティルト角: $0^\circ, 7^\circ$ 、エネルギー: 0.5, 1, 2 keV、ドーズ量: $3 \times 10^{13} \text{cm}^{-2}$)

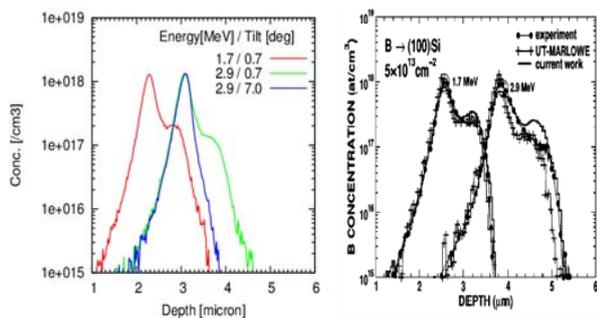


図 15 Si 基板(100)面への高エネルギーB イオン注入におけるエネルギー依存性 (左図は Advance/TCAD、右図は実験[7]による結果。ティルト角：0, 7°、エネルギー：1.7, 2.9 MeV、ドーズ量： $5 \times 10^{13} \text{cm}^{-2}$)

図 15 に Si 基板に高エネルギー (1.7, 2.9 MeV) の B イオンを注入する場合のエネルギー依存性の結果を示す。一般に電子阻止能モデルでは数百 keV 以上の高エネルギーのイオン注入の実験結果を再現することは難しいとされているが、パラメーター調整を適切に行うことで MeV オーダーの高エネルギー注入条件に対しても、不純物分布のピーク位置、ピーク高さ、テイル部分の広がりについて概ね再現することが可能となった。

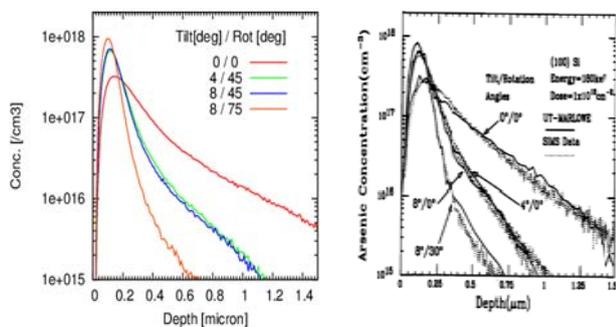


図 16 Si 基板(100)面への As イオン注入におけるティルト角依存性 (左図は Advance/TCAD、右図は実験[8]による結果。ティルト角:0, 4, 8°, エネルギー:180keV、ドーズ量： $1 \times 10^{13} \text{cm}^{-2}$)

Advance/TCAD ではパラメーター調整済みの注入イオン種として B, As, P, Sb, Al, N, BF_2 が選択可能である。さらにユーザーがパラメーターファイルを調整することで周期表の H から Pb までの元素も使用可能である。図 16 に Si 基板への As イ

オン注入におけるティルト角依存性の結果を示す。不純物分布のピーク位置、ピーク高さ、テイル部分の広がりについて概ね再現できている。図 17 に Si 基板(100)面への P イオン注入におけるドーズ量依存性を示す。 10^{13}cm^{-2} から 10^{15}cm^{-2} の幅広いドーズ量に対しても実験結果を再現できている。

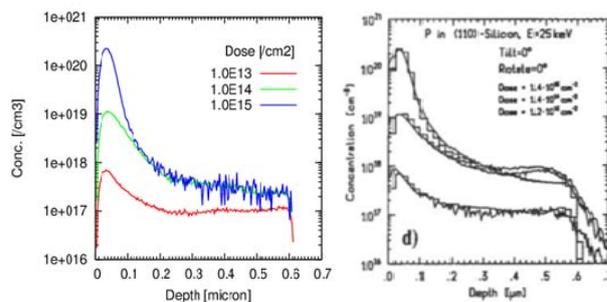


図 17 Si 基板(100)面への P イオン注入におけるドーズ量依存性 (左図は Advance/TCAD、右図は実験[9]による結果。ティルト角:0°, エネルギー:25 keV、ドーズ量: $1 \times 10^{13}, 1 \times 10^{14}, 1 \times 10^{15} \text{cm}^{-2}$)

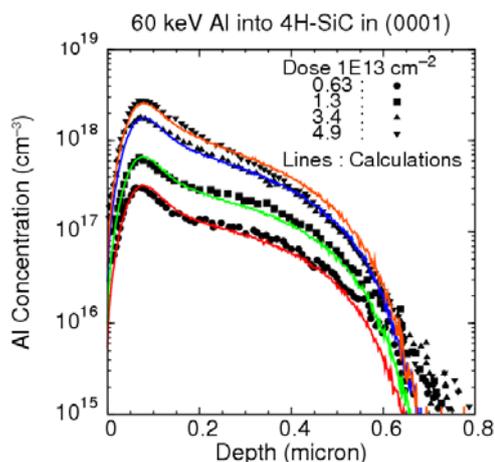


図 18 4H-SiC 基板(0001)面への Al イオン注入におけるドーズ量依存性 (実線は Advance/TCAD、プロットは実験[10]による結果。ティルト角:0°, エネルギー:60keV、ドーズ量： $0.63, 1.3, 3.4, 4.9 \times 10^{13} \text{cm}^{-2}$)

図 19 にチャネリング方向 (面に垂直な方向) に対してティルト角を 9° として Al イオン注入した場合のドーズ量依存性の結果を示す。チャネリング方向からティルト角をつけた場合でも、実験値を良く再現できている。

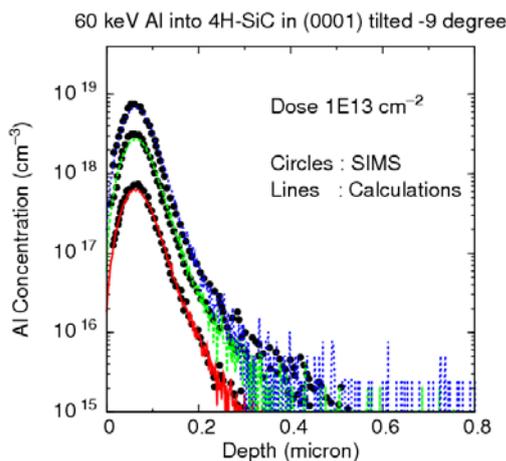


図 19 ティルト角 9° での 4H-SiC 基板(0001)面への Al イオン注入におけるドーズ量依存性 (実線は Advance/TCAD、プロットは実験[11]による結果。エネルギー : 60keV、ドーズ量 : $0.48, 2.1, 5.1 \times 10^{13} \text{cm}^{-2}$)

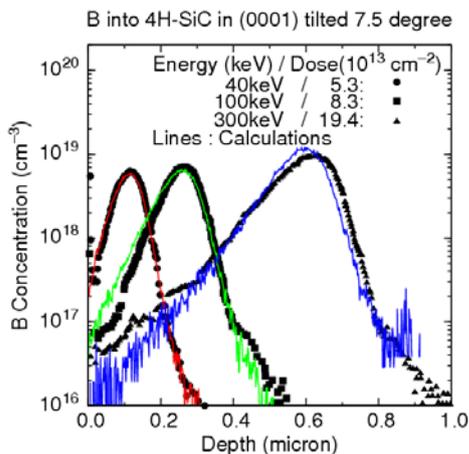


図 20 4H-SiC 基板(0001)面への B イオン注入 (実線は Advance/TCAD、プロットは実験[11]による結果。ティルト角 : 7.5° 、エネルギー/ドーズ量[keV/ 10^{13}cm^{-2}] : 40/5.3, 100/8.3, 300/19.4)

なお、図 18 と図 19 の結果は、2 節で説明した核阻止能、電子阻止能に含まれるパラメーターは全て同じものを用いている。このことから、ここで示した結果以外のさまざまな注入条件においても、高精度の結果を得られることが予測される。

以上までは、Al イオンに対するイオン注入シミュレーションの検証を行ってきた。他のイオン主のシミュレーション例として、図 20 に B イオン、図 21 に N イオンによる結果を示す。図 20, 図 21 共に、実験[11]によるピーク位置を再現している

ことから、多様なイオンに対しても、パラメーターを適切に調整することで実験値を良く再現することができていることが分かる。

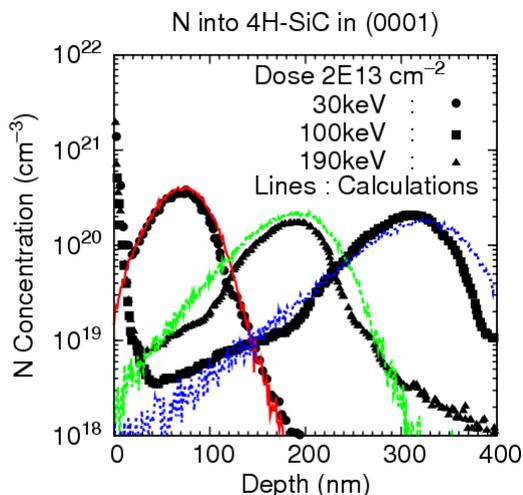


図 21 4H-SiC 基板(0001)面への N イオン注入 (実線は Advance/TCAD、プロットは実験[11]による結果。ティルト角 : 7.5° 、エネルギー : 30, 100, 190 keV、ドーズ量 : $2 \times 10^{13} \text{cm}^{-2}$)

(2) 3 次元構造へのイオン注入

ここでは、複雑な 3 次元構造へさまざまな注入条件を付加したイオン注入計算の適用事例を紹介する。

まず、Si MOSFET の Extension 形成におけるイオン注入の計算事例を示す。形成する MOSFET の全体図を図 22 に示す。今回は、図 22 の左部に描かれている、4H-SiC 基板の(0001)面にポリシリコンをマスクとして堆積させ、その全面に SiO_2 犠牲膜を 2nm 堆積させた構造に対してイオン注入を行った。

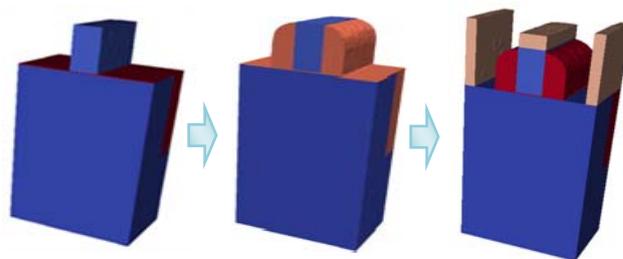


図 22 4H-SiC MOSFET の全体図
左から、Extension と拡散層へのイオン注入時の構造および電極を取り付けた全体図

Al イオンをエネルギー5.0keV、ドーズ量 $1 \times 10^{15} \text{cm}^{-2}$ で注入した。ティルト角を $0, 18^\circ$ の2ケースとしてゲート下へのしみ出しのティルト角依存性を検証した。

図 23 の左側にティルト角を 0° とした場合、右側にティルト角を 18° とした場合の結果を、ゲート中心から左半分を切り出した部分について示す。ティルト角の違いにより、チャネリングの方向の違いによる差がみられる。また、1次チャネリングのみならず2次チャネリングの影響も表れている。このような詳細なチャネリングの影響を考慮できることは、モンテカルロ法による3次元シミュレーションの利点の1つである。

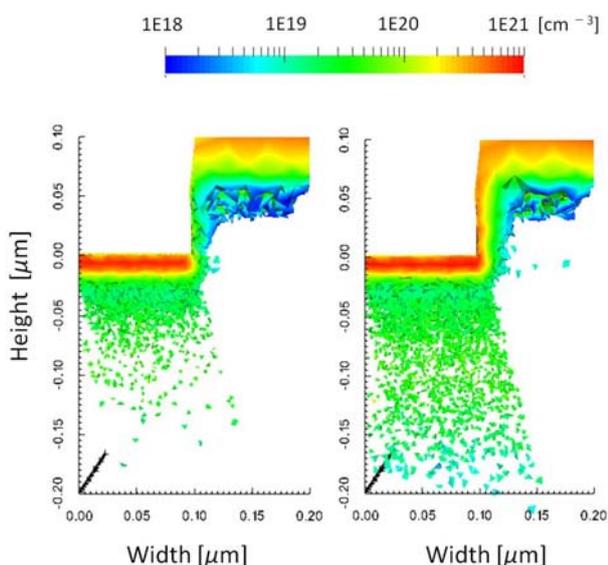


図 23 4H-SiC MOSFET の Extension 層へのイオン注入におけるティルト角依存性。ティルト角：左側 0° 、右側 18°

次に、Si 基板の六角トレンチ構造への B イオンのイオン注入シミュレーション事例を紹介する。Si 基板(100)面に対して、注入エネルギーを5keV、ティルト角を 15° 、ローテーション角を $0, 90, 180, 270^\circ$ と変化させながらイオン注入する場合のシミュレーションを行った。

図 24 の左にトレンチ構造の鳥瞰図および注入後の不純物濃度分布を示す。図 24 の右側上部に、イオン注入後の XY 平面上部から俯瞰した不純物濃度分布を示した。ティルト角をつけたことにより、トレンチの壁の影となる領域の比較的濃度が

小さくなっている。ただし完全に濃度が 0 でないのは2次照射の影響が反映されたためである。図 24 の右側下部に、右側上部の点線における ZX 平面で切り取った場合の不純物濃度分布を示した。1次チャネリングだけでなく2次チャネリングの効果もみられており、高次チャネリングへの予測が可能であることを示している。

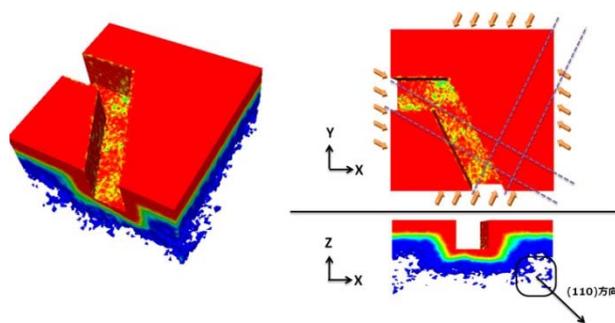


図 24 Si 基板の六角トレンチ構造へのティルト角を 15° 、ローテーション角を $0, 90, 180, 270^\circ$ の4方向からのイオン注入による不純物濃度3次元分布。左側:全体俯瞰図, 右側上部: XY 平面, 右側下部: ZX 平面

2.3.7. まとめ

本稿では、Advance/TCAD のイオン注入機能を紹介した。Si、4H-SiC 基板に対してパラメータセットの汎用性およびシミュレーションの妥当性を示した。また、4H-SiC 基板の MOSFET および Si 基板の六角トレンチ構造への斜めからのイオン注入シミュレーションにより、3次元構造に対する高次チャネリングを再現できることを示した。以上により多様な注入条件および複雑な3次元構造の影響を考慮した3次元イオン注入シミュレーションが可能であることを示した。

2.4. 不純物拡散モデル

2.4.1. はじめに

従来から半導体デバイスの主材料として用いられてきた、シリコン結晶においては、不純物(ホウ素、リン、ヒ素)について、拡散過程が詳細に調べられてきた。不純物の拡散が結晶欠陥と不純物の相互作用により発生する点欠陥拡散モデル(図 25)は、注入後の過渡増速拡散(TED)、不

純物の不活性化反応などを高精度に計算できるモデルとして、1、2次元解析では広く利用されている。一方、3次元解析では、計算時間が膨大であり、あまり実用化されていなかった。また、点欠陥拡散モデルは多様な研究者による多様なモデルが乱立しており、個々のユーザーがそれぞれ選択し、シミュレーションパラメーターのキャリブレーションを行って利用しているのが、現実である。

拡散モデルには、点欠陥・不純物反応、点欠陥クラスター反応、不純物不活性化反応を考慮する非平衡反応拡散モデルと、拡散種の拡散係数を不純物によるキャリア濃度に依存する関数で表現する Fermi モデルの2つのモデルが選択可能である。

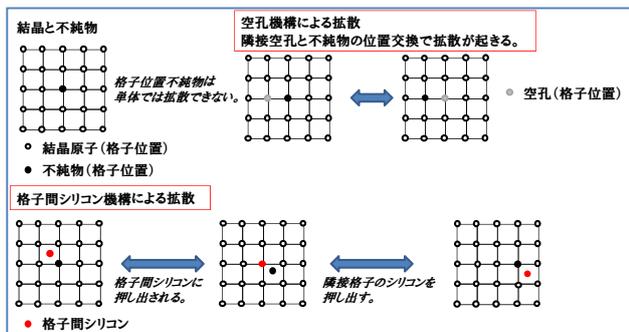


図 25 不純物の拡散が結晶欠陥と不純物の相互作用により発生する点欠陥拡散モデル

2.4.2. 非平衡反応拡散モデル

非平衡反応拡散モデルでは、拡散種 P_1, P_2, \dots, P_m に関する m 個の反応拡散方程式とポアソン方程式からなる $m+1$ 個の連立方程式を解く。

$$\begin{aligned} \frac{dC_{P_1}}{dt} &= \nabla D_{P_1} \nabla C_{P_1} - GR_{P_1} \\ \frac{dC_{P_2}}{dt} &= \nabla D_{P_2} \nabla C_{P_2} - GR_{P_2} \\ &\vdots \\ \frac{dC_{P_m}}{dt} &= \nabla D_{P_m} \nabla C_{P_m} - GR_{P_m} \end{aligned} \quad (14)$$

$$\nabla \varepsilon \nabla \varphi = -q(p - n + Q_{P_1} + Q_{P_2} + \dots + Q_{P_m})$$

ここで、 C_{P_l} は l 番目の拡散種の濃度、 D_{P_l} は l 番目の拡散種の拡散係数、 GR_{P_l} は l 番目の拡散方程式

の生成再結合項(GR)項、 ε は誘電率、 φ は静電ポテンシャル、 p は正孔密度、 n は電子密度、 Q_{P_l} は l 番目の拡散種の電荷となる。拡散中に電流が流れないと仮定すると、 p, n は次のように表現できる。

$$\begin{aligned} p &= n_i \exp\left(-\frac{\varphi}{k_B T}\right) \\ n &= n_i \exp\left(\frac{\varphi}{k_B T}\right) \end{aligned} \quad (15)$$

ここで、 n_i は真性キャリア密度、 k_B はボルツマン定数、 T は絶対温度である。

次に、境界条件について説明する。本モデルでは 3 つのタイプ (Type1、Type2、Type3) の境界条件を想定している。Type1 はノイマン境界条件であり拡散種の界面での移動がない。Type2 は表面生成再結合境界条件であり、拡散種 A の平衡濃度を定義することにより界面での拡散種 A の生成・再結合を制御する。Type3 は偏析条件であり、2 つの材料界面での拡散種の析出速度 K_{se} および偏析係数 m_s を設定することで、領域 1 から 2 への拡散種 A の偏析か、領域 2 から 1 への拡散種 A の偏析かを制御することができる。

2.4.3. Fermi モデル

Fermi モデルにおける結晶中の不純物拡散は、格子位置不純物と点欠陥 (格子間シリコン、空孔) の相互作用は考えておらず、拡散種の拡散係数を不純物によるキャリア濃度に依存する関数で表現して不純物拡散現象を解くものである。

このモデル使用する基本方程式は、

$$\frac{\partial C_A(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial r} \left[D \frac{\partial C_A(x, t)}{\partial r} \right] \quad (16)$$

となる。ここで、 C_A は拡散種の濃度に相当する。

拡散係数は、

$$D = D_i^0 + D_i^+ \left(\frac{p}{n_i} \right) + D_i^- \left(\frac{n}{n_i} \right) + D_i^- \left(\frac{n}{n_i} \right)^2 \quad (17)$$

で表される。

2.5. シリコン熱酸化過程の解析

2.5.1. はじめに

シリコンの熱酸化過程は以下の3つの物理現象からなる(i) 酸素は予形成された酸化膜中の拡散。(ii) Si-SiO₂ 界面の酸化反応。(iii)酸化膜の体積膨張。数学的にはこの3過程を偏微分方程式用いて表現し、この3つの偏微分方程式を解けばよい。ただし、酸素の拡散速度と比べ、Si-SiO₂ 界面の酸化反応十分速いため、本解析システムでは Si-SiO₂ 界面の酸化反応過程を考慮せず、酸素拡散/変形連成解析のみ考慮している。

2.5.2. 定式化

酸化シミュレーションでは酸化膜中の酸化種の拡散を解いて酸化種の濃度分布を求め、Si/SiO₂ 界面を追跡し、酸化膜内酸化種の濃度分布の時間変化を計算する。酸化膜の拡散の速さは酸化膜の成長に比べて十分早く酸化種の濃度分布は定常状態に達していると考えられるので、次の定常状態の拡散方程式を解いて酸化種の濃度分布を求める。

$$\nabla(D\nabla C) = 0 \tag{18}$$

ここではCおよびDは酸化種の濃度および拡散係数である。または、考慮すべき境界条件は境界面 $\partial_I\Omega$ における指定酸素濃度、境界 $\partial_{II}\Omega$ および $\partial_{III}\Omega$ における酸素流出や境界 $\partial_{IV}\Omega$ における相界面移動である。ここで[[X]]は相界面における不連続量を示している。

$$C(x,t) = C_I(x,t) \quad \text{on } \partial_I\Omega \tag{19}$$

$$-D\nabla C \cdot \mathbf{n} = Q_{II}(x,t) \quad \text{on } \partial_{II}\Omega \tag{20}$$

$$-D\nabla C \cdot \mathbf{n} = h(C - C^*) \quad \text{on } \partial_{III}\Omega \tag{21}$$

$$[[C]]\mathbf{v} - [[D\nabla C \cdot \mathbf{n}]] = 0 \quad \text{on } \partial_{IV}\Omega \tag{22}$$

ここではnはSi-SiO₂相界面の法線方向であり、vは相界面移動速度、hは質量輸送係数である。気相中酸素の濃度C*はヘンリーの法則より表す。

$$C^* = K_H p \tag{23}$$

ここではpは酸素の分圧、K_Hは比例定数である。

図26は解析流れ図を示している。ここに示したように本解析は酸化拡散計算、相界面位置計算、

変形計算を順次に解く形になっていて、一方向の連成解析システムになっている。酸化拡散計算と変形計算は有限要素法を用いて解いている、現時点では四面体1次要素のみを使っている。

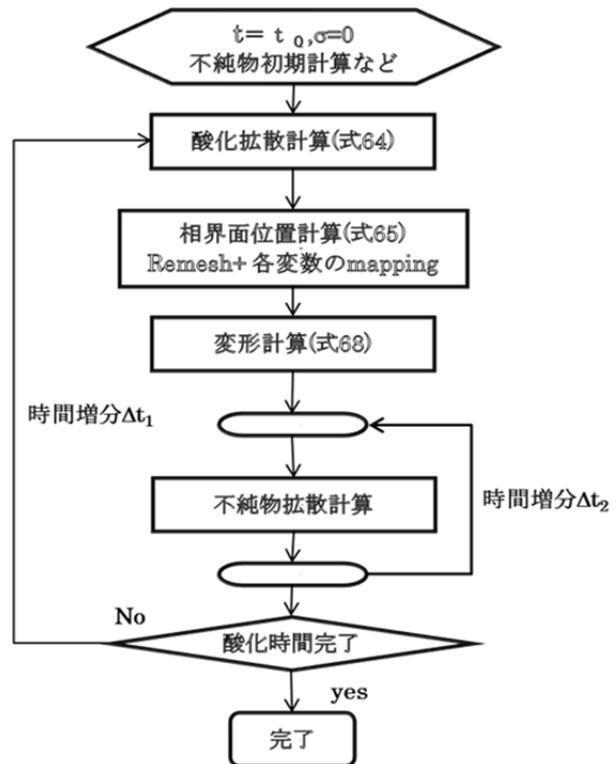


図26 解析流れ図

2.5.3. 解析例

酸素拡散 → 相変態 → 体積膨張 → 変形の一連の解析例を以下に示す。

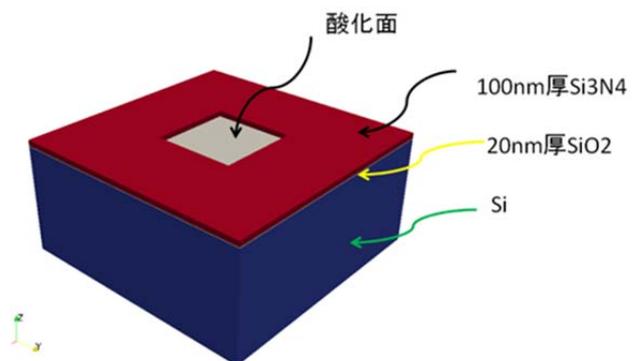


図27 酸化前の形状

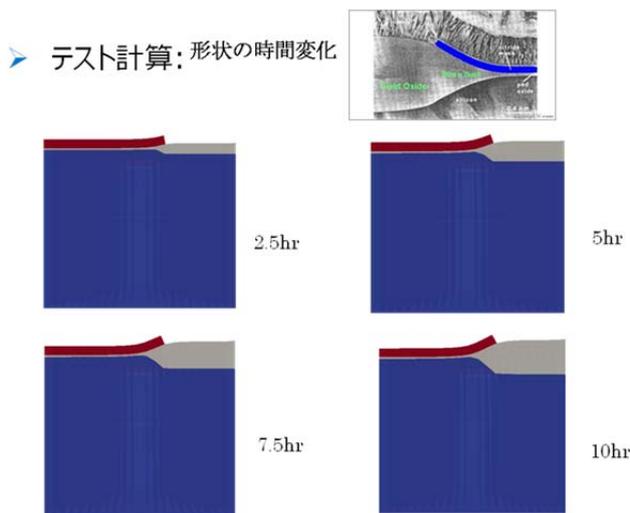


図 28 酸化過程中の形状変化

3. デバイスシミュレータ

本章では、Advance/TCAD デバイスシミュレータについて述べる。

3.1. 構成方程式と数値計算法

デバイスシミュレータは静電ポテンシャルおよび電子と正孔のキャリア密度を以下の 3 つの方程式から計算する。

$$\nabla(\epsilon \nabla \Psi) = -\rho \tag{1}$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} - \frac{1}{q} \nabla \cdot \mathbf{J}_n = G - R \tag{2}$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \frac{1}{q} \nabla \cdot \mathbf{J}_p = G - R \tag{3}$$

静電ポテンシャルはポアソン方程式(1)から求められる。ここで ρ は空間電荷密度であり、不動電荷と可動電荷(電子・正孔)より構成される。電子と正孔のキャリア密度はそれぞれの電流連続方程式(2)、(3)により計算される。定常計算の場合には(2)、(3)の時間微分項を 0 とした式を用いる。電流密度 \mathbf{J}_n と \mathbf{J}_p は以下の式で計算される。

$$\mathbf{J}_n = -qn\mu_n \nabla \psi + qD_n \nabla n \tag{4}$$

$$\mathbf{J}_p = -qp\mu_p \nabla \psi - qD_p \nabla p \tag{5}$$

ここで、 D_n 、 D_p および μ_n 、 μ_p はそれぞれ電子と正孔に対する拡散係数と移動度である。 G と R は電子・正孔対の生成・消滅項である。

このようにデバイスシミュレータはポアソン方程式、電子電流連続式、正孔電流連続式の 3 つの方程式に 3 種類の変数が絡み合った非線形方程式であり、それぞれの式を線形化して反復的に解く必要がある。

3 つの方程式をポテンシャルまたはキャリア密度のみの方程式とみなして 3 つの各変数ごとの行列式を逐次的に解く [12] Gummel 法と、3 つの方程式のそれぞれがポテンシャルとキャリア密度の両変数に関する方程式とみなして 3 つの方程式を合わせた 1 組の行列式を解くカップル法を選択可能である。

Gummel 法は 1 つの行列式の大きさがカップル法よりも小さいため一般的に計算時間が短かつメモリ使用量も少ない。そのため安定に解ける系については Gummel 法の使用を基本とする。

カップル法が有利なのは、高注入状態である。高注入状態では、ポテンシャルとキャリア密度のカップリングが強く別々に解くと解が振動する可能性がある。特にダイオードの順方向特性で効果があることを確認した。また MOSFET のオン電流計算でも、カップル法が速い場合が多い。

このように Gummel 法とカップル法のどちらが適しているかは対象とする系によって異なるため、他の市販シミュレータ同様、ユーザーが Gummel 法とカップル法を選択可能としている。

3.2. バリスティック伝導解析機能

バリスティック伝導に対する高精度・高速解析手法を搭載している。ここでは、微細 pMOSFET に対し一般化移動度を用いたバリスティック伝導解析と古典的 Drift-Diffusion (DD) モデルを用いた場合の計算時間の比較を図 29 に示す [13]。バイアススケジュールは次の 3 ステップ; 1) ゲートバイアスは零でドレイン昇圧(step A)、2) ゲート電圧昇圧(step B)、3) ドレイン電圧を零に向かって変化(step C)、とした。

バリスティック効果が顕著になる電流が On となる領域 (step B の後半から step C の前半) において一般化移動度モデルでの計算速度が DD モデルのそれと比較し、相対的に高速化することが分

かる。逆に、step A や step C のドレイン零バイアス付近（電流 Off 領域）におけるバリスティック効果が期待できない領域では、一般化移動度モデルの計算速度が低下する。総合すると、バリスティック効果が顕著となる領域で一般化移動度モデルが有効性となり、実用性を理解できる。

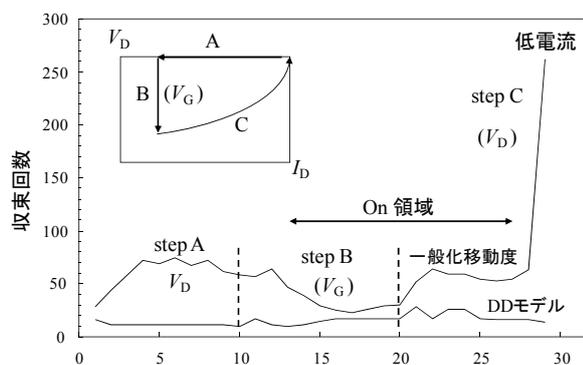


図 29 一般化移動度と DD モデルによる計算時間（第 60 回応用物理学会春季学術講演会資料[13]より）

3.3. パワーデバイス用の解析機能

3.3.1. はじめに

デバイスシミュレータでは、パワーデバイスの解析に必要な機能を開発してきた。本稿では、そのうち、二準位間遷移モデル、仮想ライフタイム法、ショットキー電極モデル、バイアスの粗密調整機能、高耐圧計算用の機能について説明する。

3.3.2. ダイオード逆方向電流の根源

ハイパワー応用に用いられるワイドギャップ半導体、例えば SiC の場合、真性キャリア密度は 10^9 cm^{-3} のオーダーとなる。Si のそれが 10^{10} cm^{-3} であることと比べると 20 桁近い差が存在する。真性キャリア密度の差を考えると、SiC ダイオードの逆方向電流は Si のそれと比較して 10 桁以上小さくなるはずであり、物理的不可測量となる。しかし、現実には Si ダイオードと同程度の逆方向電流が観測されている。この矛盾を克服するべく 2 つの準位を介した生成過程を次の節で述べる。

3.3.3. 二準位間遷移モデル

シリコンでは 1 つの準位が介在する間接型[14]、

[15]がメインであるが、4H-SiC のようにバンドギャップが 3 eV に達するとこのような遷移は容易には起こらない。一方、ダイオード順方向電流-電圧特性に関する k 値の異常を説明する理論として 2 つの準位を介した間接型モデル[16]の提案があるが、4H-SiC の場合には 2 つの準位を介しても 1 eV のエネルギー差の遷移を起こす必要があり、現実的に観測されている逆方向電流を説明するには至らない。

しかし、逆バイアスでは空乏層内に強電場が印加されるため、熱非平衡では異なる 2 つの準位 (E_{t1} , E_{t2}) がほぼ同一レベルになる可能性がある[17]。同一レベルに至った 2 つの準位の空間的距離 (d) が小さければホッピング伝導またはトンネル効果による電子遷移が可能となる。Advance/TCAD のデバイスシミュレータはこのような二準位間遷移モデルを採用している。

3.3.4. 二準位モデルによるダイオード特性解析

SiC ダイオードにおける逆バイアス特性解析を行った例を図 30 に示す。一準位モデル、いわゆる SRH モデルから予測される逆方向飽和電流値は 10^{-20} A/cm^2 のレベルとなり、実測される電流値と 10 桁も値が異なるものである。

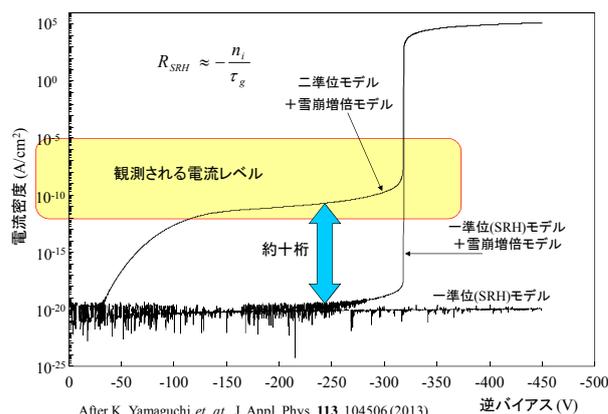


図 30 図 4.5 SiC ダイオード特性解析

これに対し、二準位モデルに基づく計算値は観測される電流レベルを予測可能としている。二準位モデルの有効性を示すものと考えている。

3.3.5. 超低電流領域の計算法

ダイオードに逆バイアスを印加した場合、ゼロバイアス近辺の低電圧領域における電流値は極端に低い。このため、電流値が数値計算精度の保証域以下になることがあり、収束性が悪化する。逆耐圧を求める解析の場合には、低電圧領域における暗電流計算を精度良く行う必要はない。そこで、計算初期において計算の収束性を高めるために、電子、正孔の Life-time を人為的に制御する手法を開発した。以降この手法を仮想ライフタイム法とする。

次図は、仮想ライフタイム法におけるバイアスステップ初期におけるライフタイムの変化を示している。バイアスステップが進み電極への印加電圧の変化に伴い、ライフタイムが徐々に変化することにより計算の収束性を高めながら計算を進め、ある程度計算が安定した頃にライフタイムを本来の値に戻し、その後は本来の値を用いるためにライフタイムは一定となる。

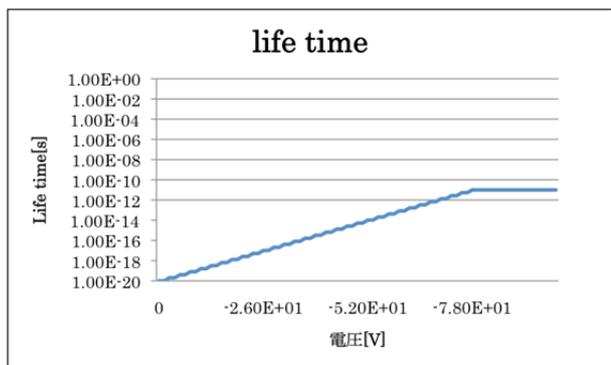


図 31 仮想ライフタイム法を用いた場合のバイアスステップ初期におけるライフタイムの変化

3.3.6. フローティング領域を伴うデバイス解析

逆バイアス印加における微弱電流値を精度良く予測可能とすることにより、パワーデバイス特有のガードリング構造、電氣的浮遊領域付き構造の解析を可能とすることが期待できる。ここでは、電位を固定しない領域（浮遊領域）を内在させる「ガードリング」と呼ばれる構造を持つものを数値解析した結果を示す。

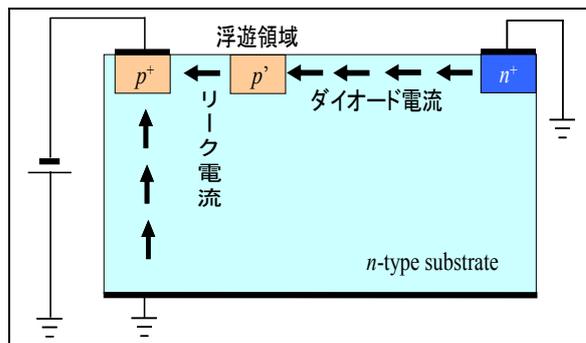


図 32 フローティング領域を伴うデバイスの模式図

計算に用いた不純物分布は以下に示すようなものを用いた。基盤全体に Sb (アンチモン) を濃度 10^{16} cm^{-3} で注入し n 領域を形成、右側の領域に同じく Sb (アンチモン) を濃度 10^{20} cm^{-3} で注入し n+領域を形成、そして左側とガードリングに（浮遊領域）に B (ボロン) を濃度 10^{20} cm^{-3} 、 10^{18} cm^{-3} で注入し p+領域と p'領域を形成している。

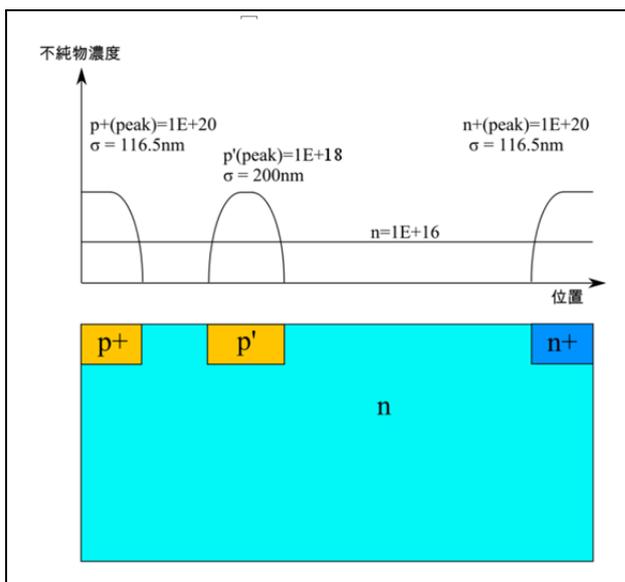


図 33 不純物分布の模式図

不純物分布作成後に得られる実際の分布を下図に示す。基板材質にはワイドギャップ半導体である SiC を採用し、その上層には SiO₂ 層を堆積させ、左右に Al 電極を形成しており、SiC 層に n、n+、p+、p'領域が形成されている。

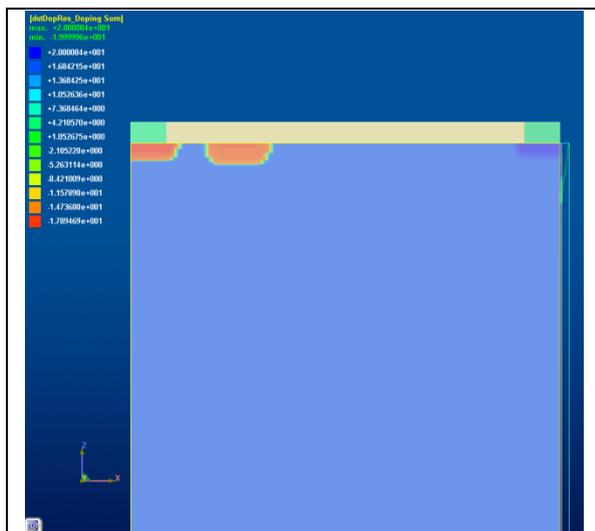


図 34 デバイスの全体図と、不純物濃度分布

次に、作成した計算格子を以下に示す。ここでは、計算精度が必要な「ガードリング」と p+領域周辺では格子密度を高く、それ以外の領域では格子密度を低くして計算全体を効率的に行い、計算時間を短縮させている。以降に示す結果では計算時間が 1/2 になったことを確認している。

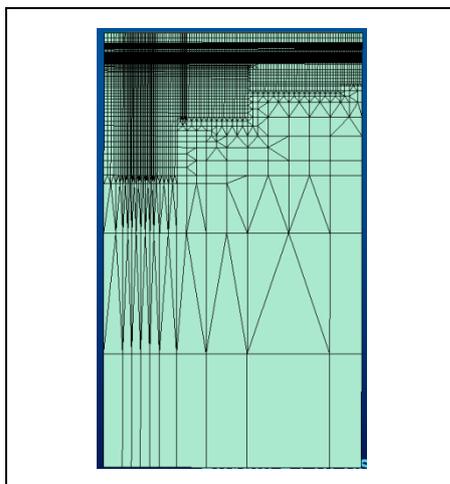


図 35 計算格子

逆バイアス計算を行った結果を以下に示す。計算においては、SiC 基板に 3C-SiC、4H-SiC、6H-SiC の 3 種類の材質を用いて耐圧特性の比較を行った。また、計算技術として、先に述べた仮想ライフタイム法と二準位モデルを用いている。下図は、計算により得られた I-V 特性を示している。結果は、材質によりブレイクダウン電圧に大きな違いが現れるものとなっており、仮定したイオン化率に即して耐圧に違いが生じていると考えられる。

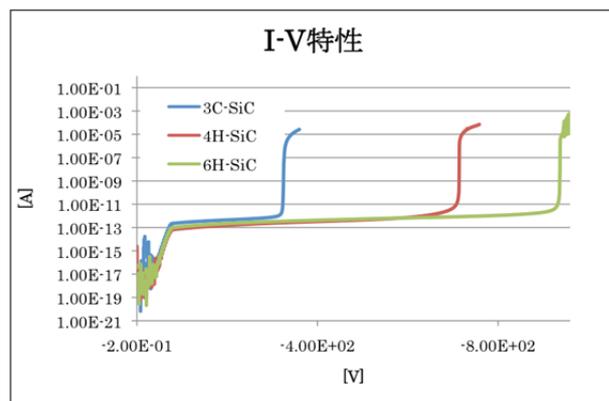


図 36 フローティング領域を伴うデバイスの模式図

ブレイクダウンの直前と直後でどのようなことが起きているのかを調べるために、4H-SiC を用いた場合の計算におけるブレイクダウン電圧近傍の電子密度分布を以下に示す。

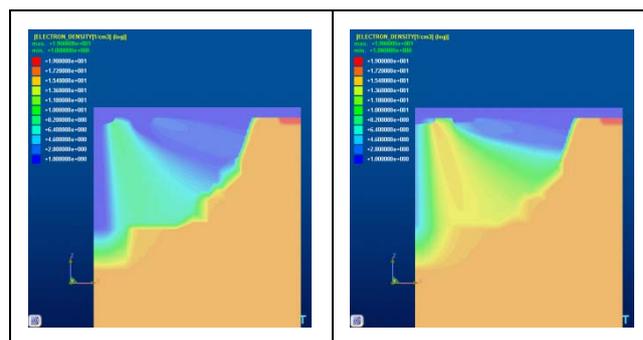


図 37 4H-SiC の計算の印加電圧が-720V (左図) と-722V (右図) の電子密度分布

上図 (左) は、ブレイクダウン直前の電子密度分布を示している。p+と p'領域を取り囲むように電子密度の高い領域が分布しており、そこから p+領域へと若干密度の高い領域が接続している。一方、上図 (右) は、ブレイクダウン直後の電子密度分布を示している。ブレイクダウン直前よりも、p+と p'領域を取り囲む高密度領域と p+領域との間を接続している領域の密度が上がり、電流が流れてはじめてブレイクダウンが発生したことが確認できる。

3.3.7. ショットキー電極モデル

(1) 電極モデル

デバイスシミュレータでは、電極金属と半導体

の接合のモデルとして、オーミック接合、n 型ショットキー接合、p 型ショットキー接合の 3 種類のモデルが選択可能である。

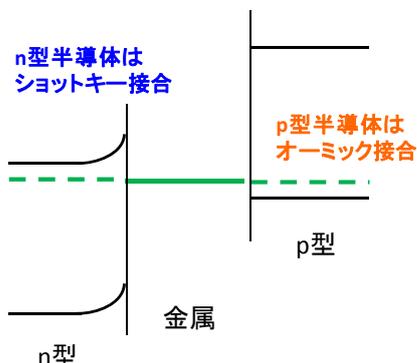


図 38 n 型ショットキー接合モデルにおけるバンド図

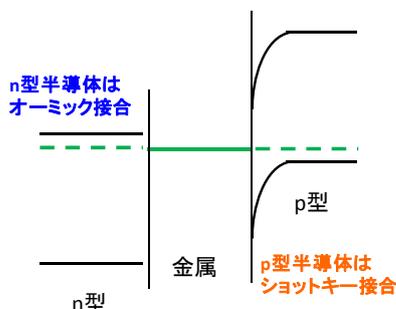


図 39 p 型ショットキー接合モデルにおけるバンド図

このうち n 型ショットキー接合と p 型ショットキー接合では、ショットキー接合電極におけるトンネル電流と熱電子放出のモデルが使用可能である。

トンネル電流モデルには式(6)に示す Fowler-Nordheim (F-N) モデルを採用した。

$$J_{FN} = AE^n \exp\left(-\frac{B}{E}\right) \tag{6}$$

$$B = \frac{4\sqrt{2m}}{3q\hbar} (q\phi_B - q\kappa)^{3/2}$$

ここで A、n、m、κ はユーザーによる入力パラメーターとしている。φ_B はバンド障壁の高さであり、電極金属の仕事関数と半導体の電子親和力から計算される。また κ はバンドの障壁低下量を表す。

熱電子放出モデルには式(7)のモデルを採用し

た。A_R はリチャードソン定数 (= 120 A/cm²/K²) である。

$$J_{TE} = J_{ST} \left[\exp\left(\frac{qV}{k_B T}\right) - 1 \right] \tag{7}$$

$$J_{ST} = A_R T^2 \exp\left(-\frac{q\phi_B}{k_B T}\right)$$

(2) 角形電極の解析事例

(a) 計算モデル

ショットキー電極モデルの解析事例として、図 40 に示すような 4H-SiC に角形電極が接続している場合の解析結果を示す。

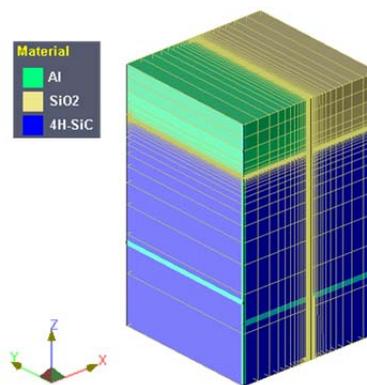


図 40 角形電極のモデル

モデルは 4H-SiC の上部に 1.5 μm × 3 μm × 1 μm の金属電極が接続している。4H-SiC のサイズは 3 μm × 3 μm × 4 μm である。4H-SiC のドーピングプロファイルを図 41 に示す。3 × 10¹⁵ cm⁻³ のドナーをドーピングし、電極角部には電界緩和用に 1 × 10¹⁵ cm⁻³ のアクセプターをドーピングした。

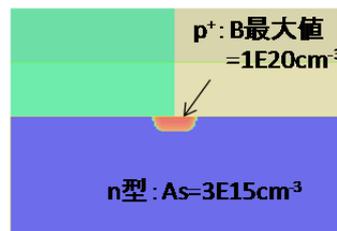


図 41 ドーピングプロファイル

電極モデルは n 型ショットキー接合モデルを選択した。これにより n 型領域とはショットキー接合、電極角部の p+ 領域とはオーミック接合すること

になる。ショットキー接合の障壁高が 0.8 eV となるように、電極の仕事関数と 4H-SiC の電子親和力を設定した。また F-N モデルパラメーターとして以下の値を使用した。

- $A = 2 \times 10^{-6} \text{ A/V}^2$
- $n = 2$
- $m = m_0$ (電子の静止質量)
- $\kappa = 0 \sim 0.5 \text{ eV}$

(b) 計算結果

0~600 V までの逆バイアスを印加したときの障壁低下量 κ のリーク電流値への依存性を図 42 に示す。障壁低下 κ が大きいほどリーク電流の耐圧が小さくなる。 $\kappa = 0.5 \text{ eV}$ では 130 V の逆バイアスでリーク電流が増大し始める。なお、 $\kappa = 0.1 \text{ eV}$ 以下では電流プロファイルは一致し、逆バイアスが 480 V で電流が増大している。この 480 V のリーク電流は F-N 電流によるものではなく、アバランシェ降伏による電流である。

次に電極角部の p+ドーピングによる電界緩和の影響を確認するため、これまでのモデルをモデル 1 とし、p+をドーピングしない場合と電極が全面を覆っていて角がないモデルをそれぞれモデル 2、3 として、 $\kappa = 0 \text{ V}$ での耐圧を比較した。0~1000 V までの逆バイアスを印加したときの印加バイアスとリーク電流の計算結果を図 43 に示す。

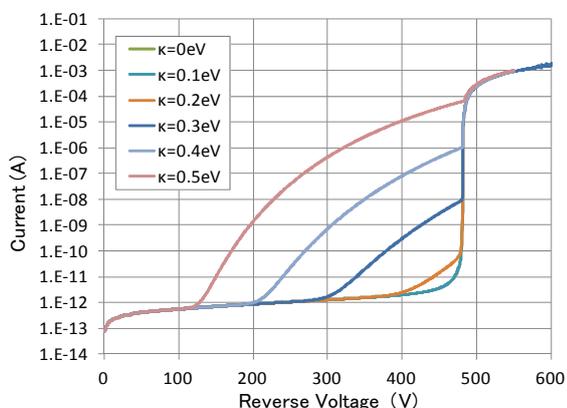


図 42 障壁低下量 κ のリーク電流依存性

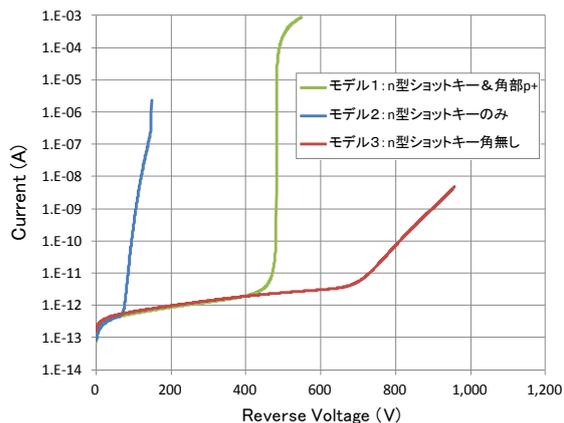


図 43 逆バイアス電流特性

リーク電流に対する耐圧は、モデル 2、モデル 1、モデル 3 の順となった。電極角部に p+領域のないモデル 2 では 80 V を超えたあたりから電流が増加するのに対し、モデル 2 は 400 V までは角のないモデル 3 と同じ量のリーク電流しか流れない。これはモデル 2 の電極角部の p+領域が電界を緩和したためである。

3.3.8. バイアスの粗密調整

バイアス粗密調整とは、デバイスシミュレーション実行における高速化手法の 1 つである。定常計算において通常は電極電圧の昇圧を複数のステップに分けて行う。

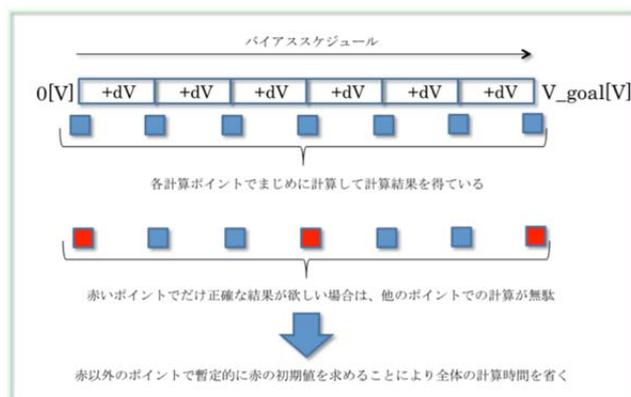


図 44 バイアス粗密調整の説明図

バイアス粗密調整機能では、収束計算の残差の判定値をユーザーが正確な結果を必要とするステップにおいてのみ本来の設定値とし、それ以外の中間のステップでは、収束判定の残差の判定値を

大きく設定する。これにより計算収束までの反復計算の回数を減らすことで計算時間を短縮する。なお以降の説明において残差の判定値を大きくする割合を ratio と記述する。

(1) Floating 領域を含む計算におけるバイアス粗密調整の効果

4.4.2 節で行ったフローティング領域を伴うデバイス解析について、バイアス粗密調整を off にした場合と ratio=10 にして計算した場合の計算時間の比較を行った結果を示す。なお、ここで用いたバイアス粗密調整のステップ間隔は 20 である。基板材質は 3C-SiC、4H-SiC、6H-SiC の 3 種類について計算を行った。図 45、図 47、図 49 に示すように、3 種類の基板材質について、ratio=10 でバイアス粗密調整を行った場合にはバイアス粗密調整が off の場合の約 2 倍の計算時間の高速化を達成した。また、図 46、図 48、図 50 に示すように、バイアス粗密調整を on にした場合と off にした場合とで、I-V 特性に殆ど違いがないことを確認した。

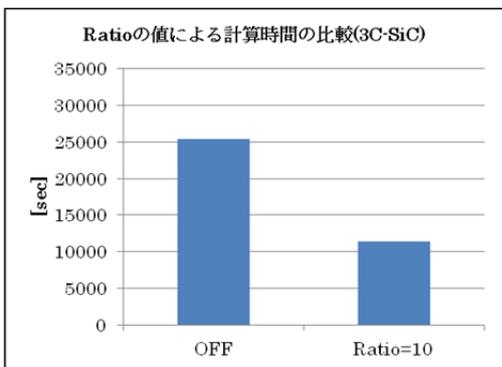


図 45 ratio 値による計算時間の比較 (3C-SiC)

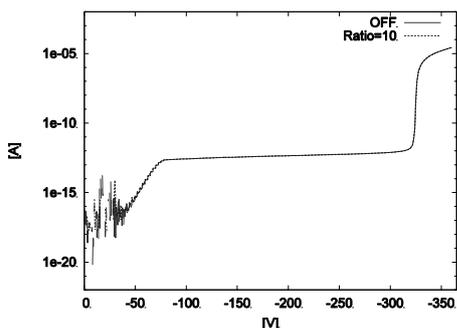


図 46 ratio 値による I-V 特性の比較 (3C-SiC)

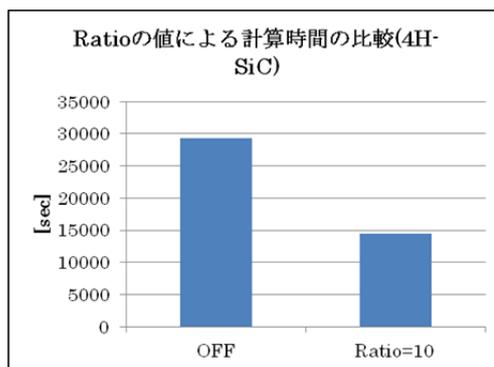


図 47 ratio 値による計算時間の比較 (4H-SiC)

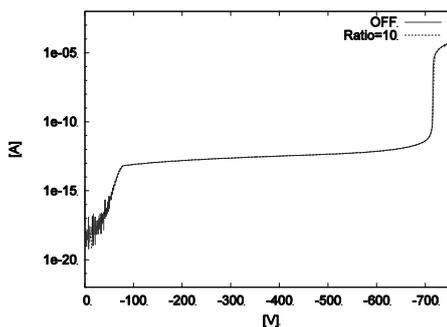


図 48 ratio 値による I-V 特性の比較 (4H-SiC)

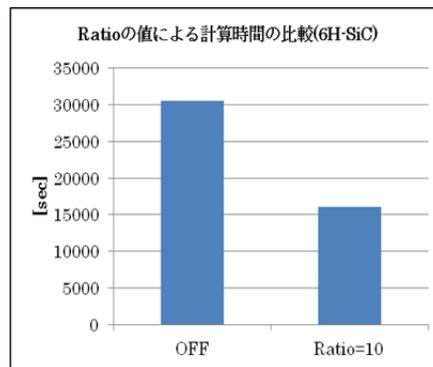


図 49 ratio 値による計算時間の比較 (6H-SiC)

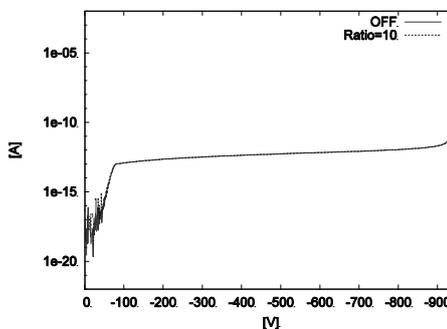


図 50 ratio 値による I-V 特性の比較 (6H-SiC)

3.3.9. 高耐圧計算事例

パワー半導体のデバイス解析においては、高耐圧計算が必要となる場面が、微細デバイスの解析

時よりも多くなると予想される。そこで、今回開発したデバイスシミュレータの高耐圧計算性能の調査を兼ねて、耐圧が 100[V]級、1000[V]級、10000[V]級の、3 つのダイオードの計算を行い得られた I-V 特性を以下に示す。計算には、半導体材料として 4H-SiC を用い、ダイオードの長さは 100[V]級が 0.4[μm]、1000[V]級が 4[μm]、10000[V]級が 80[μm]と、耐圧を上げるために役 10 倍程度ずつ長くしている。結果は、どの計算においてもブレイクダウンまで計算が可能であり、開発したデバイスシミュレータが、広バイアスレンジに対応していることを同時に示している。

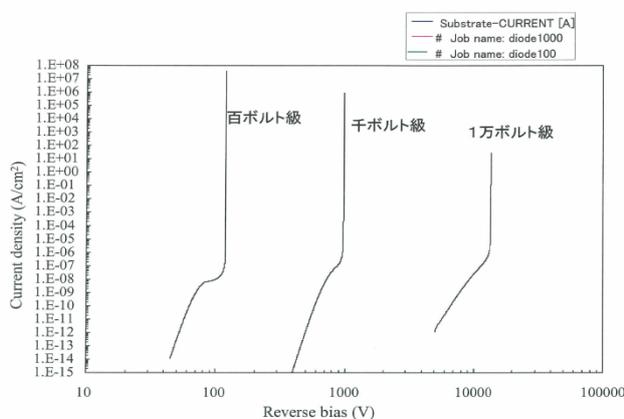


図 51 4H-SiC を用いたダイオードの耐圧計算

3.4. 複数トランジスタの一括解析

3.4.1. はじめに

半導体デバイスの微細化が進むにつれ、デバイス間の電氣的な相互作用を無視することはできない。シミュレーションにおいても同様であり、複数のデバイス部品（トランジスタやダイオードなど）からなる系については、部品単体の特性だけでなく、それらを接続する配線は接続部の寄生抵抗や、配線やデバイス間の寄生容量の影響も考慮する必要がある。

通常の複数デバイスの解析では、個々のデバイス部品を回路接続するミックスモードシミュレーション[18]が用いられている。相互作用の解析精度はユーザーがあらかじめ設定する寄生抵抗や寄生容量に依存し、寄生容量を高精度に求めるには構造 3 次元の容量解析を事前実行する負担がユーザーに課せられていた[19][20]。

今回、複数のトランジスタとそれらを接続する配線からなる系を一括してデバイスシミュレーションできる手法を開発した。寄生抵抗や寄生容量はデバイスシミュレーションで計算されるため、ユーザーが事前に値を準備しておく必要はない。本手法をデバイスシミュレータに取り込みインバータチェーンの過渡解析を実施した。

3.4.2. CMOS インバータチェーンの解析事例

複数トランジスタ一括解析の適用例として、CMOS インバータの一括過渡解析の事例について紹介する。

(a) CMOS インバータチェーン

解析対象となる 3 段の CMOS インバータチェーンの回路図を図 52 に示す。上段の 3 つのトランジスタはエンハンスメント型で PMOS であり、下段の 3 つのトランジスタはエンハンスメント型で NMOS である。PMOS は $V_{in} = V_{dd}$ のときにオフ状態であり $V_{in} < V_{dd}$ でオン状態に移行し、NMOS は V_{in} が 0 V (= V_{gnd}) のときにはオフ状態であり $V_{in} > 0$ V でオン状態に移行する。

V_{in} が 0 V (= V_{gnd}) のときには、1 段目の PMOS はオン状態、NMOS はオフ状態であるためインバータの出力となる NMOS-PMOS 配線の電位はおよそ V_{dd} となる。これが 2 段目のインバータの入力となり、2 段目の PMOS がオフ状態、NMOS はオン状態となり出力はおよそ V_{gnd} となる。これを入力とする 3 段目の動作は 1 段目と同様である。

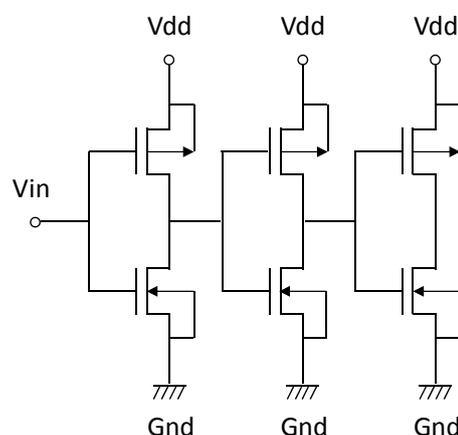


図 52 3 段 CMOS インバータチェーン回路図

(b) 計算モデルと解析条件

デバイスシミュレータ用の計算モデルの俯瞰図を図 53 に示す。便宜上、ゲート酸化膜と配線間酸化膜は非表示とした。左から 1、2、3 段の順で CMOS インバータが配置されている。手前の 3 つのトランジスタが NMOS であり奥側の 3 つのトランジスタが PMOS である。図 56 には代表的な寸法を示す。PMOS のゲート幅を NMOS のゲート幅の 2 倍とした。

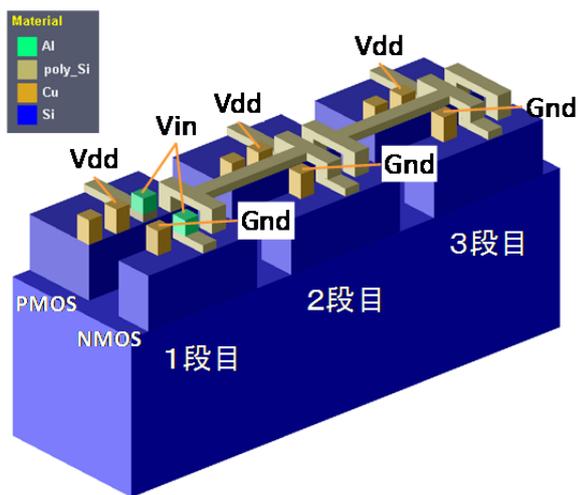


図 53 3 段 CMOS インバータチェーンの計算モデル俯瞰図 (※酸化膜は非表示)

$1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ のボロンで一様にドーピングした P 型基板上に N-well、P-well 層を設け PMOS と NMOS を形成した。ドーピングプロファイルを図 54 に示す。PMOS と NMOS のデバイス特性を反対称に近づけるため、Extension の濃度を調整した。PMOS の Extension にはボロンを $1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ でドーピングし、NMOS の Extension にはアンチモンを $3 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ でドーピングした。

解析はまず時刻 $t = 0$ 秒において Vdd に 2 V をステップ状に印加し、2.1 ns 間の過渡解析を実施し定常状態を得る。次に 2.1ns において Vin に 2 V をステップ状に印加する。これ以降 0.6ns 間の過渡解析を実施した。

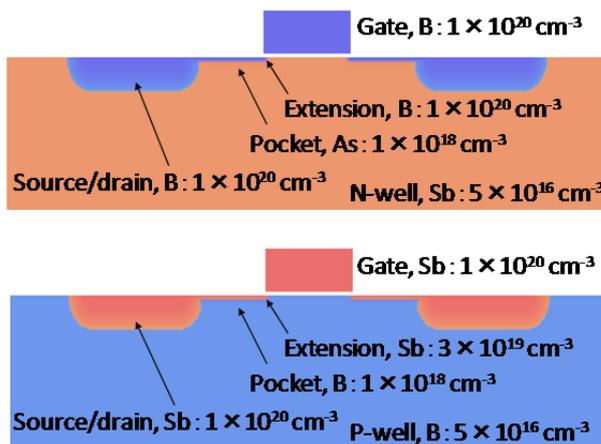


図 54 PMOS (上) と NMOS (下) のドーピングプロファイル

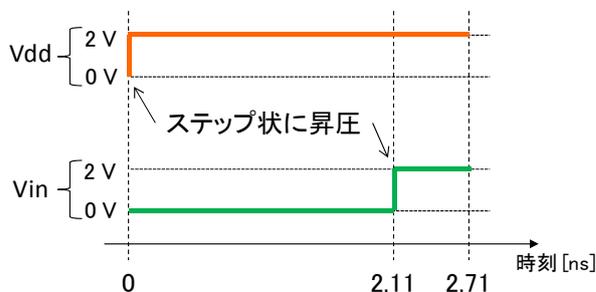


図 55 過渡解析バイアス印加方法

(c) 計算結果

図 57 に Vin 印加後の静電ポテンシャルの時間変化を示す。Vin 印加直後にパルス状の変化が 1 段目に顕著にみられるが、これは $t = 2.11 \text{ ns}$ で瞬間的に 0 V \rightarrow 2 V に昇圧したことによる。

1、2、3 段目の順で静電ポテンシャルが反転している。1 段目は Vin へのバイアス印加後すぐに (0.01 ns のオーダーで) 静電ポテンシャルが 2 V から下がり始めているのに対し、2 段目は 0.3 ns 後から、3 段目は 0.6 ns 後から下がり始める。

なお、E/D NMOS インバータのモデルと異なり、各段の NMOS のサイズを同一にしているため、反転終了までの時間が段ごとに大きく異なることはなかった。

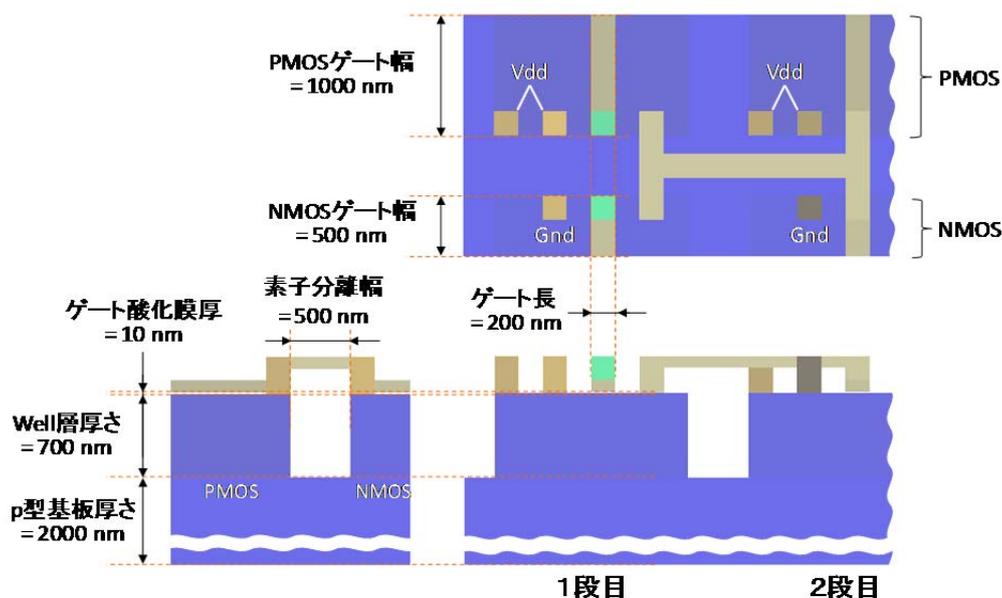


図 56 3段 CMOS インバータチェーンの計算モデル平面図 (※酸化膜は非表示)

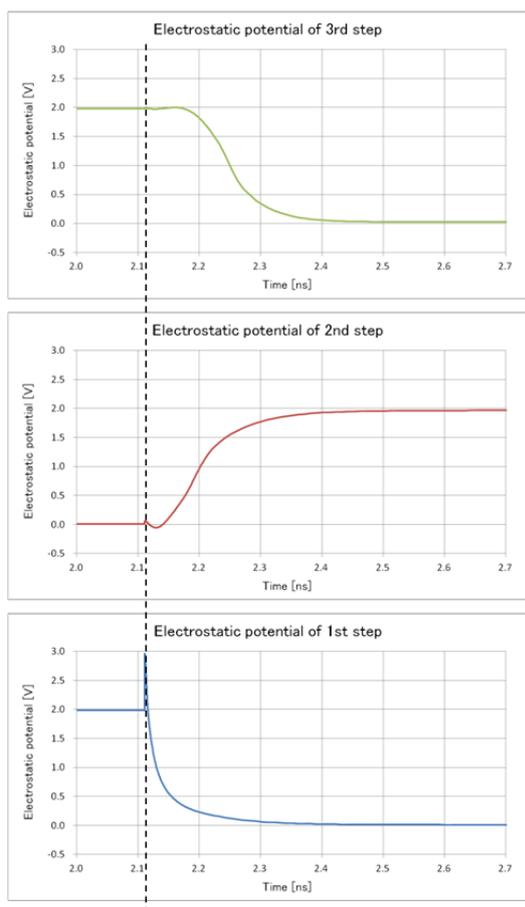


図 57 Vin 印加後 0.6 ns 間 (t = 2.11 ~ 2.71 ns) の各段の静電ポテンシャルの時間変化

3.5. 外部因子による生成項

3.5.1. 機能概要

デバイスシミュレータでは、太陽電池やソフトエラーのように、外部からの電磁場や放射線により電子・正孔対が発生する場合の解析が可能である。これら外部因子による定常的な生成量をメッシュファイルに指定しソルバーで読み込む。読み込まれた値は電子と正孔の電流連続方程式の生成・消滅項 (GR 項) に反映される。ソフトエラーの過渡解析のように、ある時間だけ電子・生成項が発生するような場合には、その時間だけ生成量を含んだメッシュファイルを使用し、それ以外は生成量を含んでいないメッシュファイルを使用することでシミュレーションが可能となる。

3.5.2. 太陽電池デバイスの解析機能

デバイスシミュレータでは、太陽電池の解析用に、太陽光入射による生成項を算出する外部プログラムを備えている。本プログラムは以下の条件を満たすモデルを対象としている。

- XY 方向の境界面の影響は考慮しない。つまり電子正孔対発生量は深さ方向のみに依存することになる。
- 入射面の微小スケールの凹凸の影響は、入射面の相対屈折率 n に含まれるとする。

- 光の干渉は考えない。

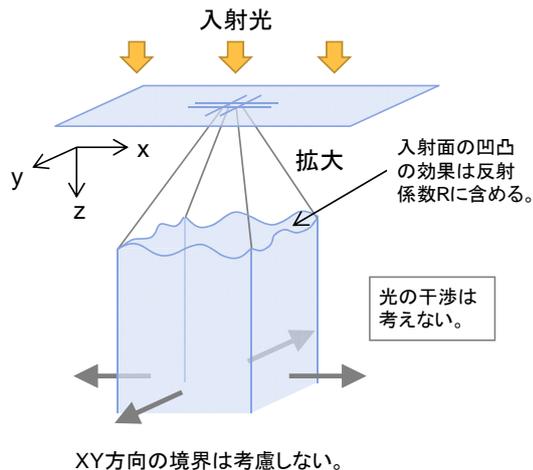


図 58 本プログラムが対象とする太陽電池デバイス模式図

本プログラムは入射光スペクトル、対象デバイスの屈折率、吸収係数を入力としてデバイス内の電子生成対の生成量を計算しメッシュファイルに追記する。本プログラムのファイル構成を図 59 に示す。太陽光スペクトルデータファイルには波長ごと (単位: nm) の太陽光強度 (単位: $W/m^2/nm$) が記述されている。入射面 (Air-Si 界面) 相対屈折率データファイルには入射面における波長ごとの相対屈折率が記述される。反射面 (Si-SiO₂ 界面) 相対屈折率データファイルには反射面における波長ごとの相対屈折率が記述される。吸収係数データファイルには波長ごとの Si 基板の吸収係数 (単位: $1/cm$) が記述される。これらのデータファイルにはデフォルト値がテキスト形式で設定されているが、ユーザーが編集することも可能である。

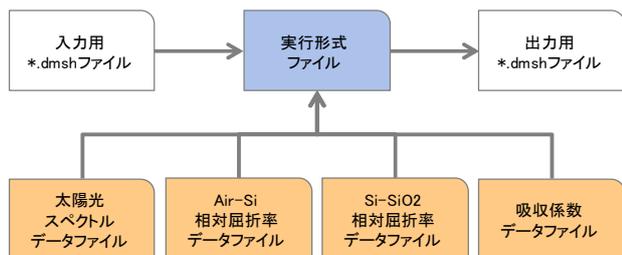


図 59 ファイル構成

3.5.3. DRAM ソフトエラーの過渡解析事例

(1) 解析モデル

デバイスシミュレータを用いて α 線による DRAM のソフトエラーの発生過程を解析した。DRAM にビット 1 が書き込まれた状態、つまりキャパシタが正に帯電した状態を初期状態とする。この状態において図 60 左の DRAM 回路図に示す位置に α 線が入射する場合を解析する。図 60 右には計算で使用したモデルと α 線入射位置を示す。 α 線はキャパシタの n+型ドープ領域と Si 基板の p 型ドープ領域の間の空乏層に Si 表面に垂直に入射される。

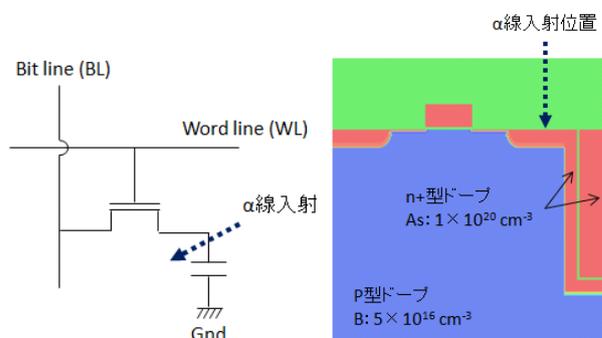


図 60 α 線による DRAM のソフトエラー回路図 (左) とモデル (右)

一般的な α 線のエネルギーを 1~10 MeV 程度とし保護膜を通過して 0.1 MeV までエネルギーが減衰した α 線が Si 表面に到達すると仮定する。この α 線による電子・正孔対生成として、 $10 \times 10 \times 478 \text{ nm}^3$ の領域に 22 ps 間の間に 28000 個の電子・正孔対を発生させた。このときの電子、正孔密度分布と静電ポテンシャル分布を図 61 に示す。

(2) 過渡解析計算結果

次に生成項の設定をオフにし過渡解析を実施した。図 62 に 1、10、100 ps 後における静電ポテンシャル分布を示す。空乏層に発生した電子-正孔対のうち、電子はキャパシタの n+領域に移動し正孔は p 領域に移動する。1 ps 後では空乏層付近に等電位の薄オレンジ色の領域が広がっていることから、生成された正孔が移動していることが分かる。10 ps 後では、キャパシタの n+領域は薄黄緑色に変化しており、電子が n+領域に流入してい

ることを示す。また p 領域では水色の領域が基板電極の方向に拡大しており、正孔が基板電極に向かって移動していることが分かる。100 ps 後では n+領域は濃い黄緑色になっており、発生した電子の大半が n+領域に移動したことで正の帯電が消滅し DRAM がビット 0 の状態に変化したことが分かる。また p 領域は α 線入射前の電位 (青色) に戻っており、発生した正孔の大半が基板電極へ移動したことが分かる。

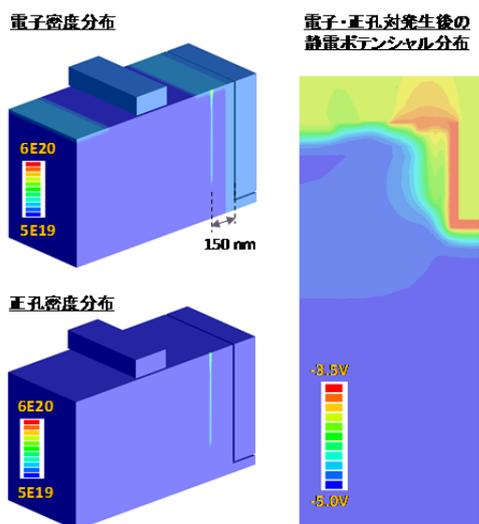


図 61 電子・正孔対発生後の電子、正孔密度と静電ポテンシャル分布

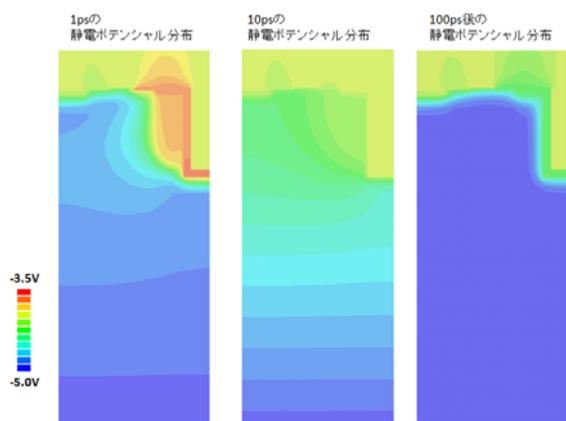


図 62 α 線入射後 1 ps (左)、10 ps (中)、100 ps (右) における静電ポテンシャル分布

4. 大規模解析

Advance/TCAD の大きな特徴は大規模計算に対応していることである。以下ではそのための機能のうち、並列計算機能と強連成一括解析機能について述べる。

4.1. 並列計算機能

Advance/TCAD は並列計算が可能である。並列計算により大規模なモデルについても短時間での解析が可能となる。以下に、デバイスシミュレータ、プロセスシミュレータ (拡散計算) における並列計算について述べる。

デバイスシミュレータについて、以下に示す CMOS の計算モデルに対して並列化効率の評価を行った。評価に際して、122 万節点のモデルを基本とし、並列計算時に最もデータ転送量が少なくなるように格子を分割した 239 万節点のモデル (z increase model) と、最もデータデータ転送量が多くなるように格子を分割した 260 万節点のモデル (x-y increase model) の 2 種類のモデルを作成した。この 2 種類のモデルの並列化効率を比較することで、並列計算時のデータ転送量が並列化効率に与える影響が明らかになる。

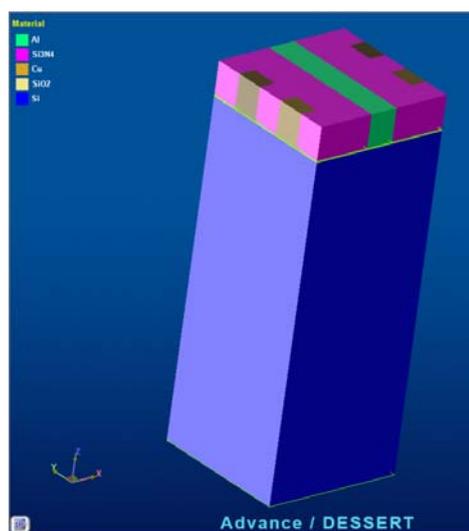


図 63 テスト例題に用いた CMOS 構造

| | |
|---|---|
| Base model + Number of nodes..... 1215200 + Number of elements..... 1161270 + Number of control volumes... 1222366 + Volume of mesh..... 5.171875E-21 [m3] | X-Y increase model + Number of nodes..... 2604000 + Number of elements..... 2522520 + Number of control volumes... 2617844 + Volume of mesh..... 5.171875E-21 [m3] |
| | Z increase model + Number of nodes..... 2391200 + Number of elements..... 2287350 + Number of control volumes... 2398366 + Volume of mesh..... 5.171875E-21 [m3] |
| | |

図 64 基本モデルとそこから作成した 2 つのモデル
この 2 種類のモデルについて並列化効率を取得

並列計算を使用しない場合（1CPU コア）と並列計算使用時の計算時間を 1CPU コア時に対する割合として図 65 に示す。並列計算は、2、4、8、24、36CPU コアの 5 種類の計算を実施した。ここで、縦軸の値の逆数が並列化効率を示している。8CPU コア以上では並列化効率に明らかな違いがみられ、z increase model の方が、x-y increase model よりも高い並列化効率を得られた。36CPU コア使用時には、z increase model で約 10 倍、x-y increase model で約 7 倍の並列化効率となった。この並列化効率の差は 2 つのモデルのデータ転送量の違いによるものである。

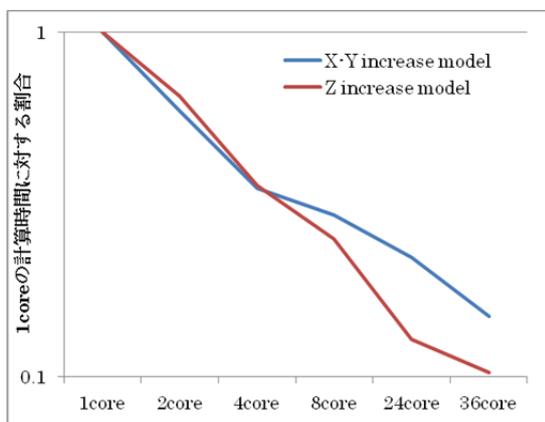


図 65 1CPU コアによる計算時間に対する使用 CPU コア数を増加させていった場合の計算時間の割合（両対数グラフ）

次に、プロセスシミュレータの拡散計算における並列化効率について述べる。計算モデルとして図 66 に示すモデルを使用する。計算規模は 16109 要素×10 方程式=160 万規模となっている。なお図 66 は並列計算の有無による結果の差がないことを確認した際の様子を示したものである。

CPU コア数を変化させた際の並列化効率の結果を図 67 に示す。使用した計算機は当社の PC クラスタである。CPU コア数を増やしていくと計算時間は短くなり、8CPU コア使用時には約 5 倍、36CPU コア使用時には約 9 倍の並列化効率を得られている。次に、海洋研究開発機構が所有するスーパーコンピュータ UV2000 を使用した場合の結果を図 68 に示す。16CPU コアで約 9 倍の並列化効率を得られており当社の PC クラスタよ

りも少ないコア数で同じ並列化効率を達成している。この違いは、使用環境におけるデータ通信速度の違いが原因であると考えられる。

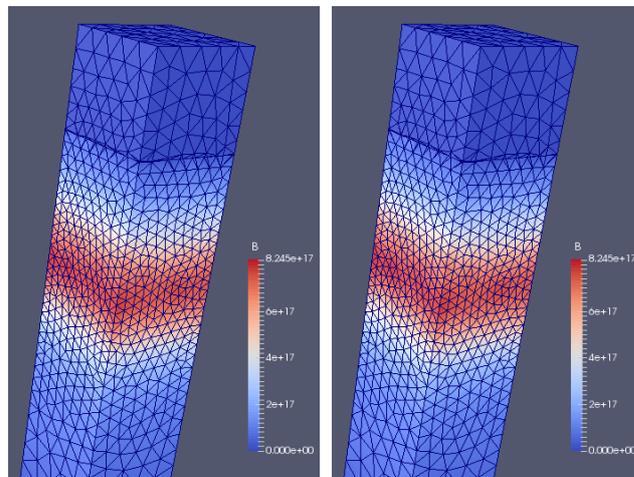


図 66 1CPU コアによる計算結果(左図)と 4CPU コアによる計算結果 (右図)

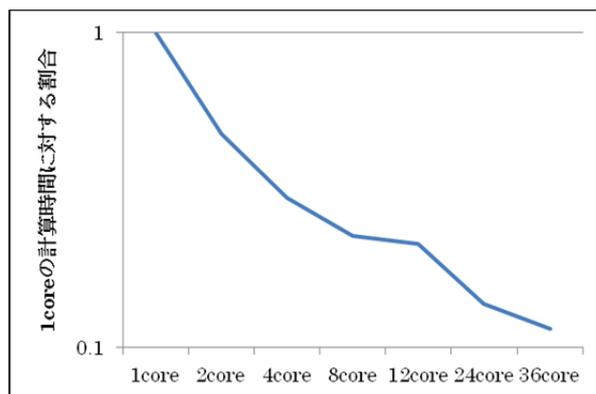


図 67 1CPU コアによる計算時間に対する使用 CPU コア数を増加させていった場合の計算時間の割合（両対数グラフ）：当社の PC クラスタ環境

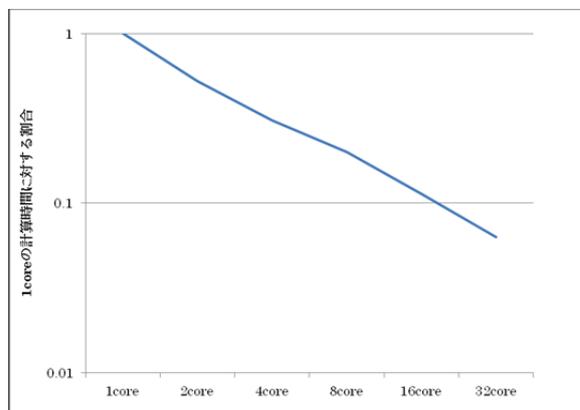


図 68 1CPU コアによる計算時間に対する使用 CPU コア数を増加させていった場合の計算時間の割合（両対数グラフ）：UV2000 におけるデータ

4.2. 複数デバイスと回路の強連成一括解析機能

Advance/TCAD デバイスシミュレーションで複数デバイスを一括計算する手法についてはすでに説明したとおりであるが、これに加えて外部回路も併せて一括解析することが可能である。特に回路方程式の線形化式をポアソン方程式の行列式と一括して解く強連成解析機能を搭載していることで、従来手法と比べて計算速度と計算精度の両方が向上している。

複数デバイスと回路の強連成機能を使用することで、下図に示すモータスイッチングデバイスや CMOS リングオシレータの解析などが可能となる。特にモータスイッチングデバイスの解析では、行列式を別々に解く計算手法と比較して強連成一括解析手法では約 20 倍の計算速度向上を確認している。

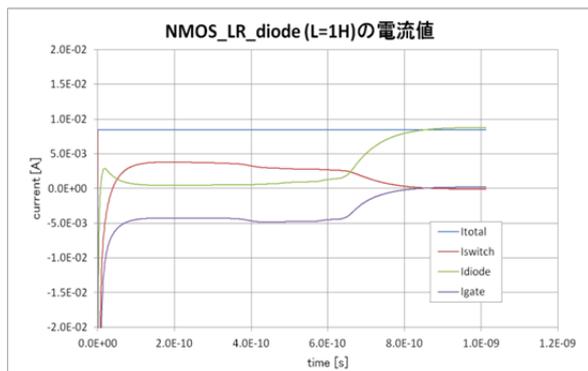
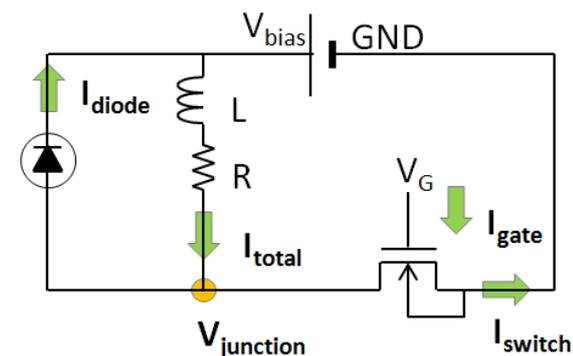


図 69 モータスイッチングデバイスの計算事例回路図（上）と電流値の時間変化（下）

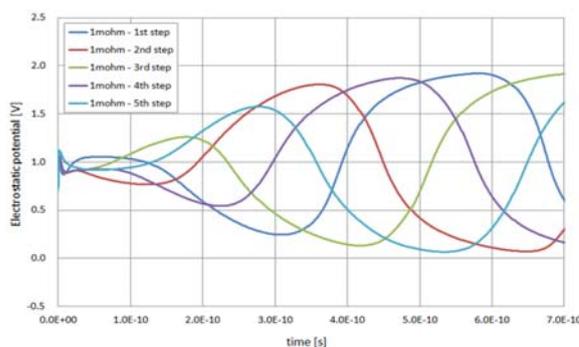
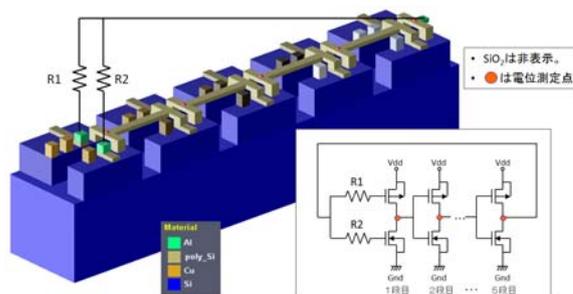


図 70 5 段 CMOS リングオシレータのデバイスと回路の一括解析モデル（上）と解析結果（下）

参考文献

- [1] J. F. Ziegler, J. P. Biersack, M. D. Littmark, “SRIM”, ISBN-13 978-0-9654207-1-6, 2008
- [2] J. Lindhard, M. Scharff and M. Schiott, “Range concepts and heavy ion ranges”, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. vol.33, pp.1-42, 1963
- [3] B. Firsov, “A qualitative interpretation of the mean electron excitation energy in atomic collisions”, Zhur. Eksptl'. i Teoret. Fiz. vol.36, 1959
- [4] S. J. Morris, B. Obradovic, S.-H. Yang and A. F. Tasch, “Modeling of Boron, Phosphorus, and Arsenic implants into single-crystal silicon over a wide energy range”, IEDM Tech. Digs., pp.721-724, 1996
- [5] M. J. Norgett, M. T. Robinson and I. M. Torrens, “A proposed method of calculating displacement dose rates”, Nuclear Engineering and Design, vol.33, pp.50-54, 1975
- [6] G.Hobler *et.al.*, “Modeling of Ultra-Low Energy Boron Implantation in Silicon”, IEDM 97, Tech. Digs., pp.489-492, 1997

- [7] L. Rubin, W. Shaw *et al.*, "Ranges and Moments of Depth Distributions of Boron and Phosphorus Implanted into Silicon in the Energy Range 1.7 - 5.0 MeV with an Eaton NV -GSD/VHE Implanter", 11th International Conference on Ion Implantation Technology, pp.567-570, 1996
- [8] Shyh-Horng Yang *et al.*, "Monte Carlo Simulation of Arsenic Ion Implantation in (100) Single-Crystal Silicon", IEEE Trans. Semicond. Manuf. vol.9, pp.49-58,1996
- [9] A.Simionescu *et al.*, "Modeling of electronic stopping and damage accumulation during arsenic implantation in silicon", Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B, vol.100, pp.483-489, 1995
- [10] J. Wong-Leung *et al.*, "Effect of crystal orientation on the implant profile of 60 keV Al into 4H-SiC crystals", Journal of Applied Physics, vol.93, pp.8914-8917, 2003
- [11] Sang-Sun Lee *et al.*, "Empirical Depth Profile Model for Ion Implantation in 4H-SiC", Journal of the Korean Physical Society, vol.41, pp591-593, 2002
- [12] H. K. Gummel, "A self-consistent iterative scheme for one-dimensional steady state transistor calculations" IEEE Trans. Electron Devices, vol. ED-11, no. 10, pp. 455 - 465, 1964
- [13] 山口、桑原、小池、"次世代 TCAD (4) 準バリスティックモデルの高精度・高速計算法" 第 60 回応用物理学会春季学術講演会、講演番号 28p-G7-4、2013 年 3 月 28 日 神奈川工科大学、2013 年(平成 25 年)春季
- [14] W. Shockley and W. T. Read, "Statistics of recombinations of holes and electrons", Phys. Rev., vol. 87, no. 5, pp. 835-842, Sept. 1952
- [15] R. N. Hall, "Electron-hole recombination in germanium", Phys. Rev., vol. 87, p. 387, July 1952
- [16] A. Schenk and U. Krumbein, "Coupled defectlevel recombination: Theory and application to anomalous diode characteristics" J. Appl. phys., vol. 78, pp. 3185 - 3192, 1995
- [17] K. Yamaguchi, T. Kuwabara, and T. Uda, "A generation/recombination model assisted with two trap centers in wide band-gap semiconductors" J. Appl. Phys, 113, 104506 (2013)
- [18] J. Gregory Rollins and John Choma, Jr., "Mixed-Mode PISCES-SPICE Coupled Circuit and Device Solver", IEEE Trans. Computer-Aided Design, vol. 7, no. 8, pp. 862 - 867, August 1988
- [19] Y. Takemura, K. Osada, M. Yagyū, K. Yamaguchi, J. Ushio and T. Maruizumi, "Three-dimensional capacitance analysis in an SRAM cell", 2000 International Conference on Solid State Devices and Materials, August 380 - 381, 2000, Sendai, Japan
- [20] Y. Takemura, K. Osada, M. Yagyū, K. Yamaguchi, J. Ushio and T. Maruizumi, "Three-dimensional effects obtained from capacitance analysis of an SRAM cell", Technical Proc. Of the 4th Int. Conf. On Modeling and Simulation of Microsystems (MSM2001), p. 394, SC., USA
- [21] 小池 秀耀ほか, "Made in Japan の LSI デバイス設計 CAD システム Advance/TCAD", アドバンスシミュレーション, Vol.21 (2015).

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 (カラー版) 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。