

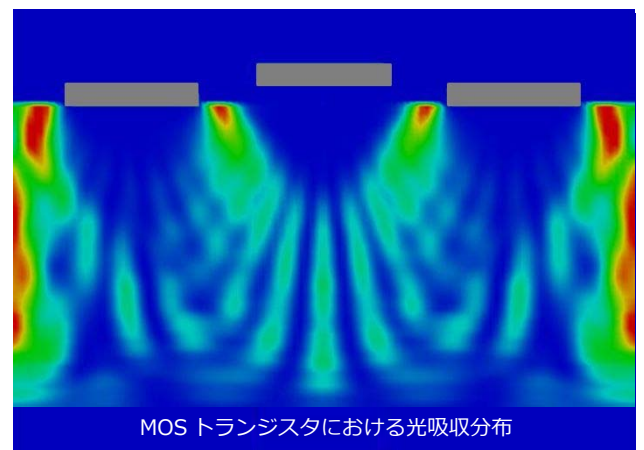


光と半導体の連成解析システム ご紹介セミナー

2017年9月21日(木)開催

13:30~13:40 (10分)	主催者あいさつ アドバンスソフト株式会社のご紹介.....	1
13:40~13:55 (15分)	電磁波解析ソフトウェア Advance/ParallelWave の概要	5
13:55~14:10 (15分)	LSI デバイス設計 CAD システム Advance/TCAD の概要	13
14:10~14:40 (30分)	光と半導体の連成解析事例のご紹介.....	23
14:40~15:00 (20分)	GUI を用いた光と半導体の連成解析のデモ	
15:00~15:20 (20分)	(休憩)	
15:20~15:50 (30分)	電磁波解析ソフトウェア Advance/ParallelWave の要素技術	35
15:50~16:20 (30分)	LSI デバイス設計 CAD システム Advance/TCAD の機能詳細	49
16:20~16:30 (10分)	価格および関連サービスのご紹介、質疑応答	

memo



アドバンスソフト株式会社のご紹介

第1事業部 原田 昌紀

光と半導体の連成解析システムご紹介セミナー
2017年9月21日(木)
アドバンスソフト株式会社

会社概要

名称 アドバンスソフト株式会社
(英文社名 AdvanceSoft Corporation)

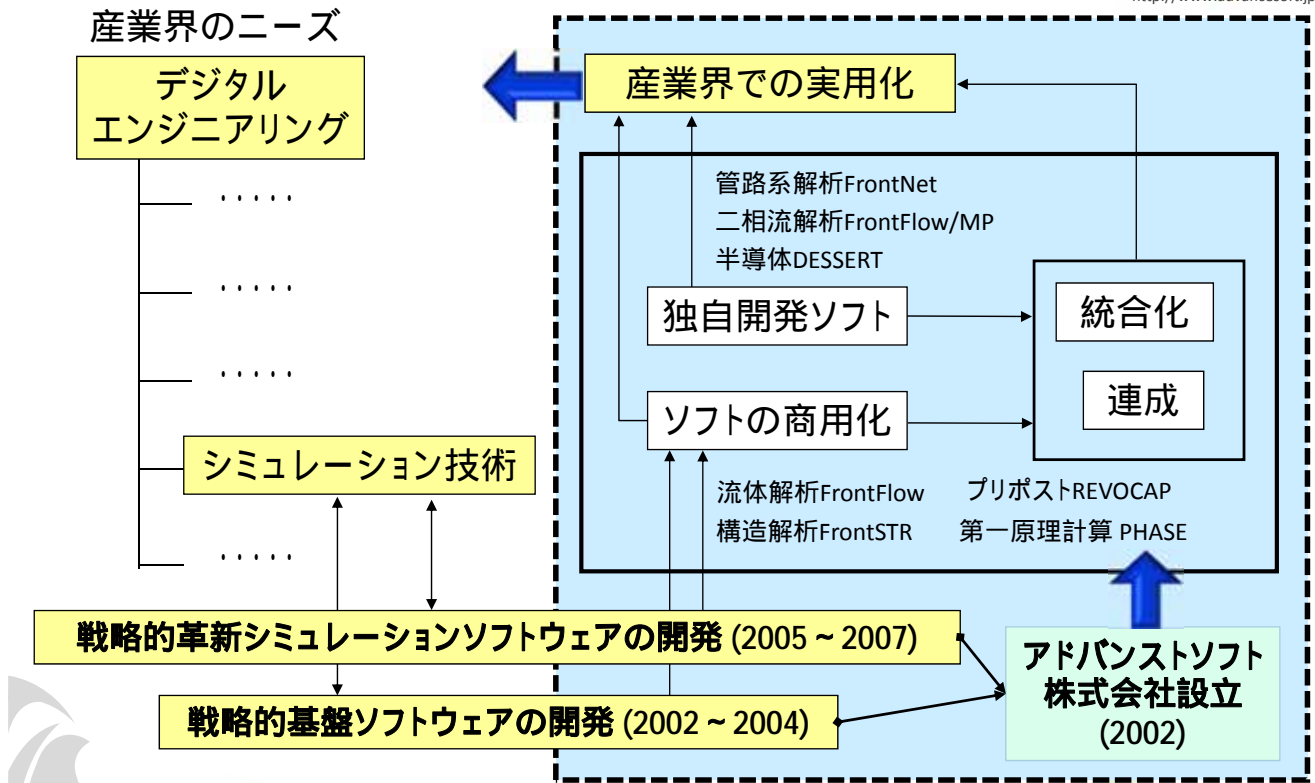
本社 〒101 0062
東京都千代田区神田駿河台4-3
新お茶の水ビル17階
TEL: 03 6826 3970
FAX: 03 5283 6580

設立 2002年(平成14年)4月24日

資本金 3,724万円

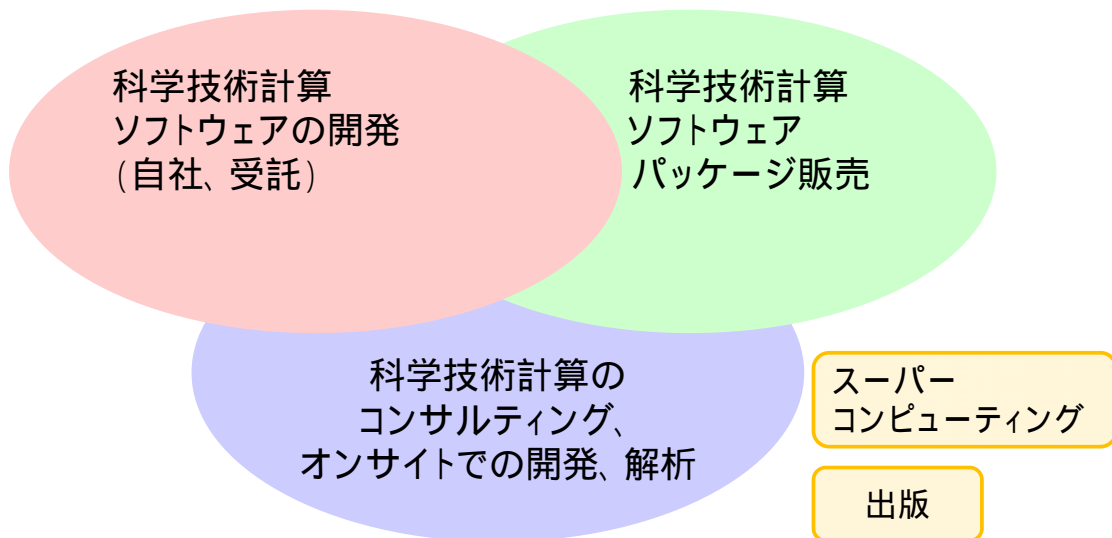
社員数 98名(2017年9月19日時点)

事業部	部	業務概要
第1事業部	技術第1部	・ナノ材料の第一原理計算、量子化学計算やメソ領域の開発など
	技術第2部	・プリポスト・可視化システム・連成システム開発、構造解析エンジニアリングなど
	技術第6部	・次世代TCADシステムの開発 ・環境関連の開発、解析業務
第2事業部	技術第4部	・混相流に係わる次世代流体システム開発など
第3事業部	技術第3部	・乱流、燃焼、化学反応等に係わる次世代流体システム開発など
	技術第7部	・J-PARCに係わるプロジェクトの実施等 ・発電・化学プラントやライフライン等の管路系流体解析エンジニアリング業務、次世代流体解析システム保守・販売サポート
第4事業部	技術第5部	・原子力・エネルギー利用に係る安全性解析など
—	総合企画部	・スーパーコンピューティングサービス ・防災シミュレーション ・コンサルティングサービスの提供 ・解析サービスの提供
営業本部	営業部	・お客様窓口

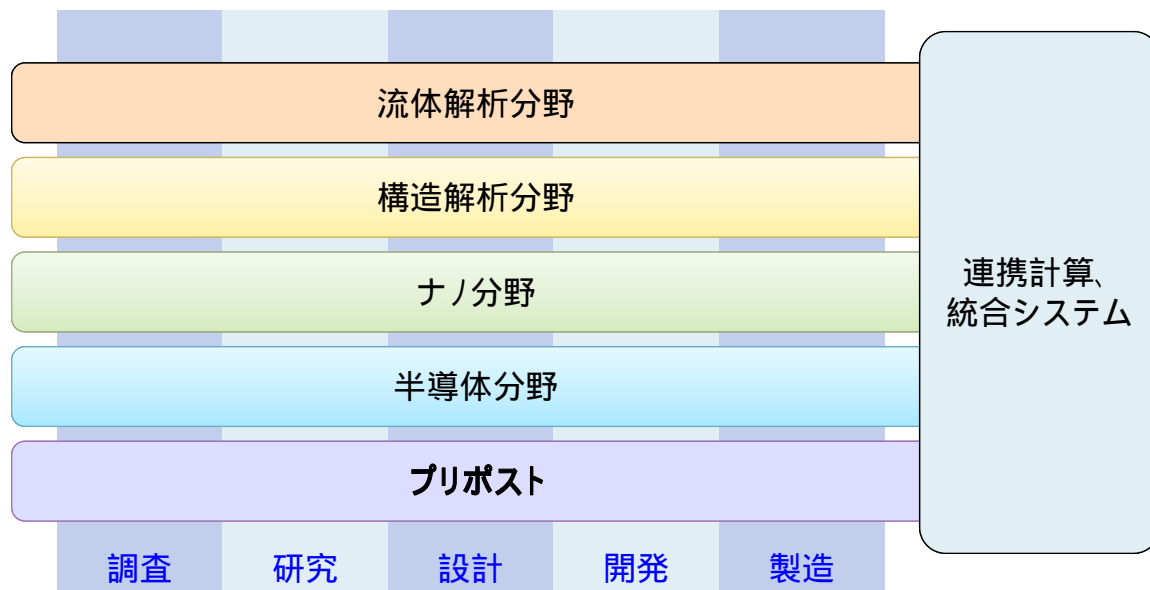


事業内容

アドバンスソフトがご提供するサービス



科学技術計算ソフトウェアの開発を基礎とした、
科学技術計算に関する様々なソリューションをご提供します。



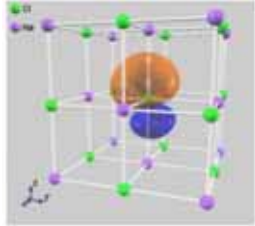
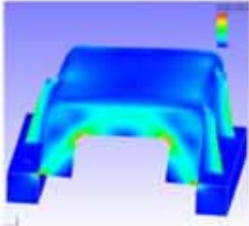
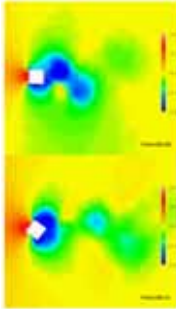
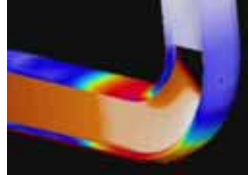
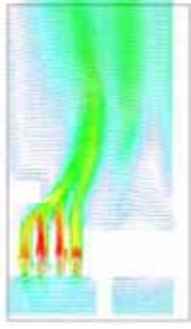
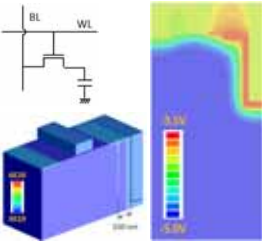
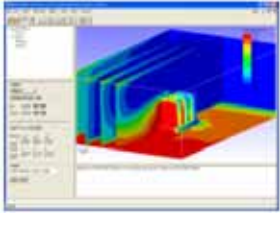
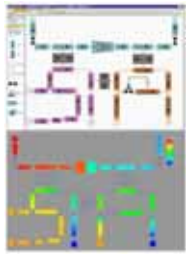
産業の主要な分野のあらゆるフェーズで直面する課題に対し、
科学技術計算によるソリューションをご提供します。

アドバンスソフトのパッケージソフトウェア

ソフトウェア名称	解析内容
Advance/PHASE	第一原理計算ソフトウェア
Advance/FrontSTR	構造解析ソフトウェア
Advance/FrontNoise	音響解析ソフトウェア
Advance/TCAD	半導体プロセス・デバイスシミュレータ
Advance/ParallelWave	電磁波解析ソフトウェア
Advance/REVOCAP	構造解析・流体解析プリポストプロセッサ
Advance/FrontFlow/red	流体解析ソフトウェア
Advance/FrontFlow/MP	気液二相流解析ソフトウェア
Advance/FrontFlow/FOCUS	高速流・爆発解析ソフトウェア
Advance/FrontNet	管路系1次元流体解析ソフトウェア群

上記は主要パッケージを掲載しています。詳細は弊社HP (www.advancesoft.jp)をご参照ください。

アドバンスソフトのパッケージソフトウェア

<p>ナノ</p> <p>Advance/PHASE</p> 	<p>構造</p> <p>Advance/FrontSTR</p> 	<p>流体</p> <p>Advance/FrontFlow/red Advance/FrontFlow/FOCUS</p>   <p>Advance/FrontFlow/MP</p> 	
<p>半導体</p> <p>Advance/TCAD</p> 	<p>プリポスト</p> <p>Advance/REVOCAP</p> 	<p>Advance/FrontNetシリーズ</p> 	

上記は主要パッケージを掲載しています。詳細は弊社HP (www.advancesoft.jp) をご参照ください。

facebook、YouTubeでも関連記事を掲載中

<http://www.facebook.com/advancesoft.jp>

<http://www.youtube.com/user/advancesoft>



電磁波解析ソフトウェア Advance/ParallelWaveの 概要

2017年9月21日
アドバンスソフト株式会社
第1事業部 技術第6部
並木 武文



Copyright © 2017 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

内 容

- ◆ ParallelWaveの特長
- ◆ 電磁波解析とは
- ◆ FDTD法の概要
- ◆ TCADとの連携



Copyright © 2017 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

◆ アドバンスソフトが開発した電磁波解析ソフトウェア

Maxwell方程式を3次元で解く

電磁波の透過、反射、吸収、干渉、回折などの現象を解析する

◆ FDTD法を採用

汎用的で効率的で高精度な解析を実施

◆ 大規模解析に対応

高効率な並列版ソルバーを用意

逐次版のライセンスで並列計算が可能

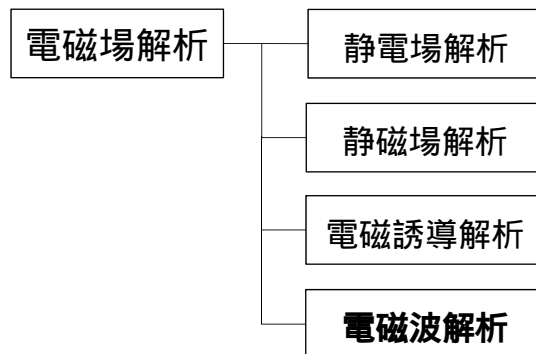
◆ TCADとの連携機能

TCADとシームレスな連成解析により光電変換を実施

◆ 幅広い適用対象

- ・ マイクロ波デバイスやアンテナの高周波特性
- ・ 電子機器からの漏洩電磁界
- ・ 電子機器への静電気放電
- ・ レーダの散乱断面積
- ・ 自動車や電車の周囲および内部の電磁界
- ・ 人体や生体の周囲および内部の電磁界
- ・ 落雷による過渡電磁界
- ・ **光の透過、反射、吸収、干渉、回折**

◆ Maxwell方程式を数値計算によって解く電磁場解析の一手法



◆ 主な電磁波解析の手法

	境界要素法	有限要素法	有限差分法
周波数領域	モーメント法	FEM	FDFD法
時間領域			FDTD法

目

FDTD法の概要

◆ 基礎方程式はMaxwell方程式の2つの回転の式

$$\varepsilon \frac{\partial \vec{E}(\vec{r}, t)}{\partial t} + \sigma \vec{E}(\vec{r}, t) = \text{rot } \vec{H}(\vec{r}, t)$$

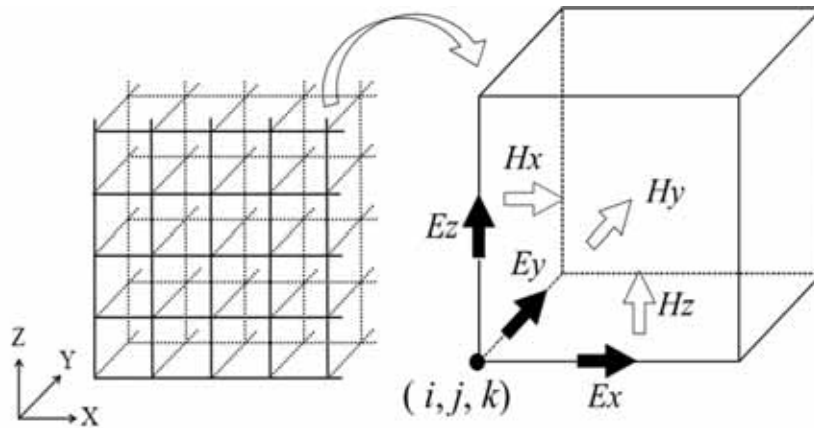
$$\mu \frac{\partial \vec{H}(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\text{rot } \vec{E}(\vec{r}, t)$$

\vec{E}	電界ベクトル
\vec{H}	磁界ベクトル
\vec{r}	空間座標
t	時刻、時間
ε	誘電率
σ	導電率 (電気伝導率)
μ	透磁率

◆ FDTD法は、これらの式を時間と空間について差分法で解く

◆ Maxwell方程式の2つの発散の式は自動的に満足される

- ◆ 差分法で解くために3次元空間を直交差分格子で分割
- ◆ 格子間隔は不均一でも構わない
- ◆ 電磁界成分を差分格子上にスタッガード配置 (Yee格子)
- ◆ 媒質定数 (誘電率、導電率、透磁率) は各格子に設定



FDTD法の定式化

$$\epsilon \frac{\partial \vec{E}(\vec{r}, t)}{\partial t} + \sigma \vec{E}(\vec{r}, t) = \text{rot } \vec{H}(\vec{r}, t) \Rightarrow \epsilon \frac{\partial E_x}{\partial t} + \sigma E_x = \frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z}$$

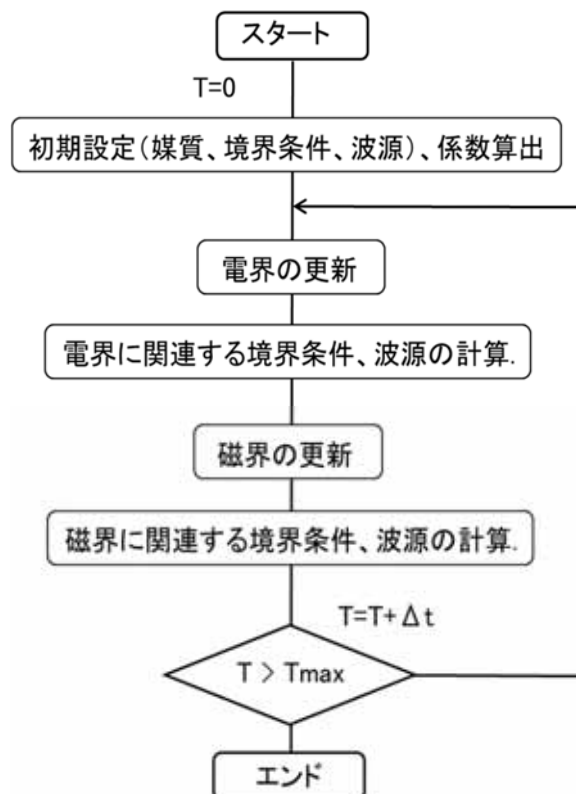
$$E_x^{n+1}(i+1/2, j, k) = \frac{2\epsilon(i, j, k) - \sigma(i, j, k)\Delta t}{2\epsilon(i, j, k) + \sigma(i, j, k)\Delta t} E_x^n(i+1/2, j, k) + \frac{2\Delta t}{2\epsilon(i, j, k) + \sigma(i, j, k)\Delta t} \left(\frac{H_z^{n+1/2}(i+1/2, j+1/2, k) - H_z^{n+1/2}(i+1/2, j-1/2, k)}{\Delta y(j)} - \frac{H_y^{n+1/2}(i+1/2, j, k+1/2) - H_y^{n+1/2}(i+1/2, j, k-1/2)}{\Delta z(k)} \right)$$

格子点(i+1/2, j, k)上の時刻n+1の電界が
 同じ格子点上の時刻nの電界と
 隣接する格子点上の時刻n+1/2の磁界により
 更新される

$$\mu \frac{\partial \vec{H}(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\text{rot } \vec{E}(\vec{r}, t) \quad \Leftrightarrow \quad \mu \frac{\partial H_x}{\partial t} = \frac{\partial E_y}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial y}$$

$$H_x^{n+1/2}(i, j+1/2, k+1/2) = H_x^{n-1/2}(i, j+1/2, k+1/2) + \frac{\Delta t}{\mu} \left(\frac{E_y^n(i, j+1/2, k+1) - E_y^n(i, j+1/2, k)}{\Delta z(k)} - \frac{E_z^n(i, j+1, k+1/2) - E_z^n(i, j, k+1/2)}{\Delta y(j)} \right)$$

格子点(i, j+1/2, k+1/2)上の時刻n+1/2の磁界が
 同じ格子点上の時刻n-1/2の磁界の値と
 隣接する格子点上の時刻nの電界によって
 更新される



- ◆ FDTD法は陽解法のため下記のCFL条件の制約を受ける

$$\Delta t \leq \frac{1}{v \sqrt{(1/\Delta x_{\min})^2 + (1/\Delta y_{\min})^2 + (1/\Delta z_{\min})^2}}$$

Δx_{\min} 、 Δy_{\min} 、 Δz_{\min} はそれぞれ x 、 y 、 z 方向の最小格子間隔
(v は電磁波の速度、真空中では光速)



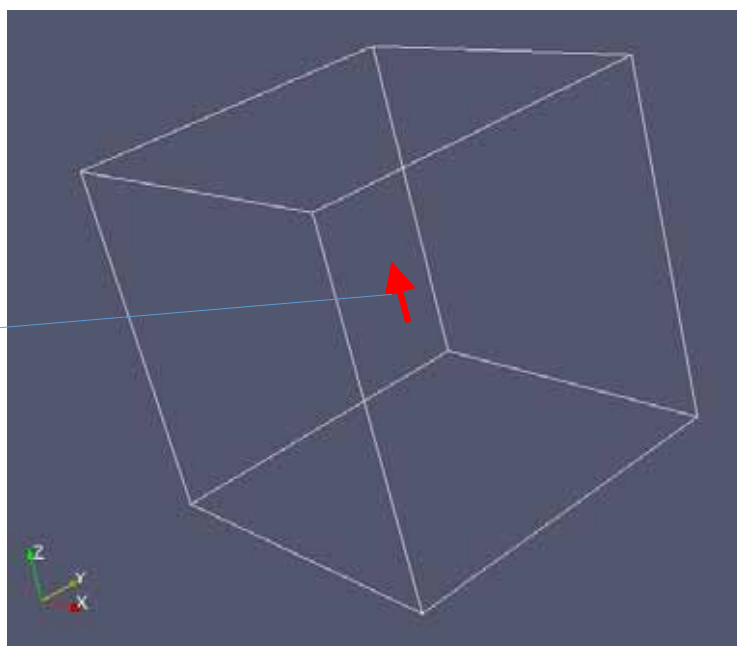
- ◆ 微細な差分格子があると Δt を小さくしなければならず
計算時間が増加する

ADI-FDTD法（無条件安定）も発明されている

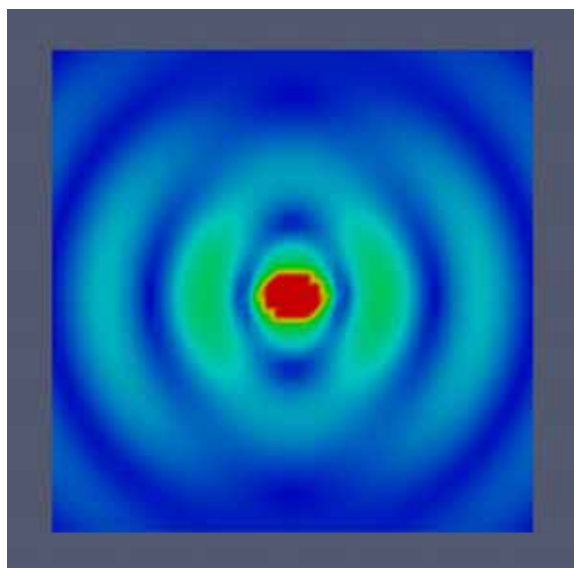
T. Namiki, "A new FDTD algorithm based on alternating-direction implicit method,"
IEEE Trans. Microwave Theory Tech., vol. 47, pp.2003–2007, Oct. 1999.

領域終端：吸収境界条件

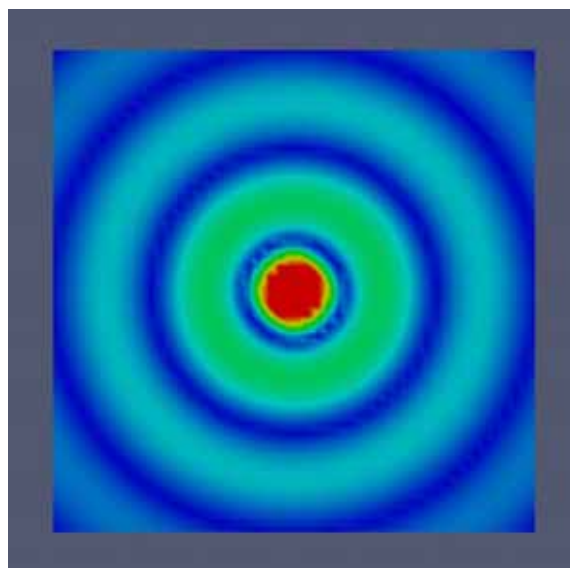
微小ダイポール
 $E_z = \sin(\omega t)$



計算事例（真空中の微小ダイポール）



X面内の電界変動

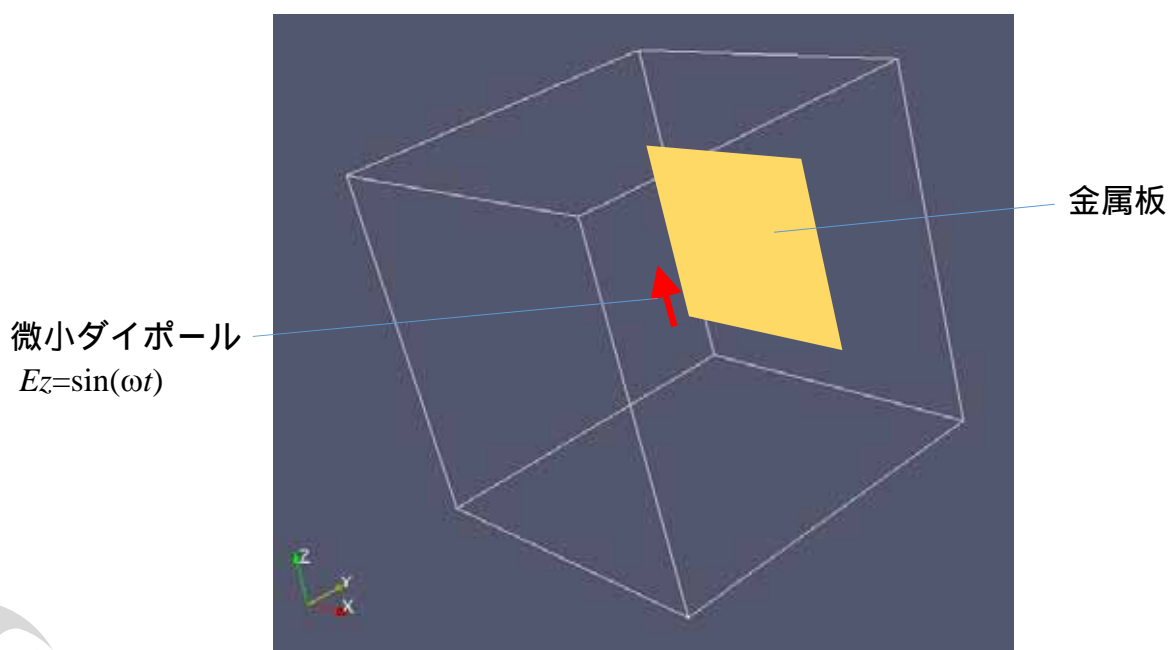


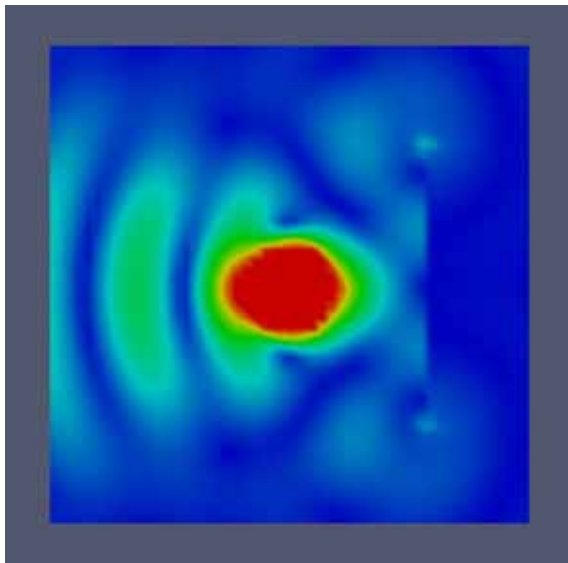
Z面内の電界変動



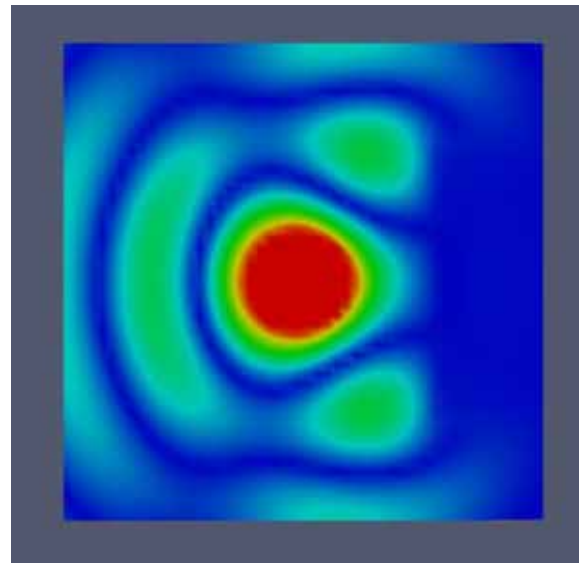
計算事例（真空中の微小ダイポール）

領域終端：吸収境界条件



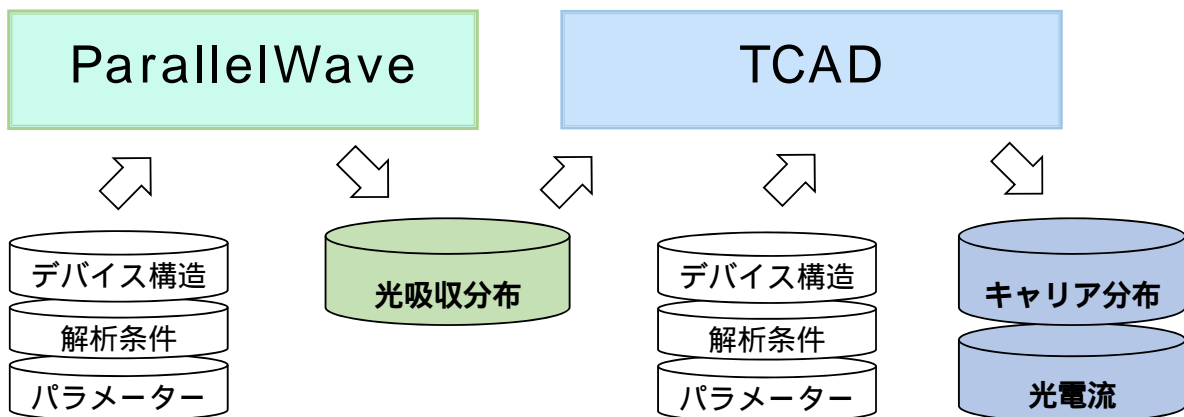


X面内の電界変動



Z面内の電界変動

TCADとの連携



電磁波解析により半導体内部の光吸収分布を算出する [ParallelWave]

光吸収分布をキャリア分布に光電変換する [TCAD]

デバイスシミュレーションにより発生する光電流を算出する [TCAD]

キャリア分布 = 電子/正孔対発生濃度分布

LSI デバイス設計CAD システム Advance/TCAD の概要

第1事業部 原田 昌紀

光と半導体の連成解析システムご紹介セミナー
2017年9月21日（木）
アドバンスソフト株式会社

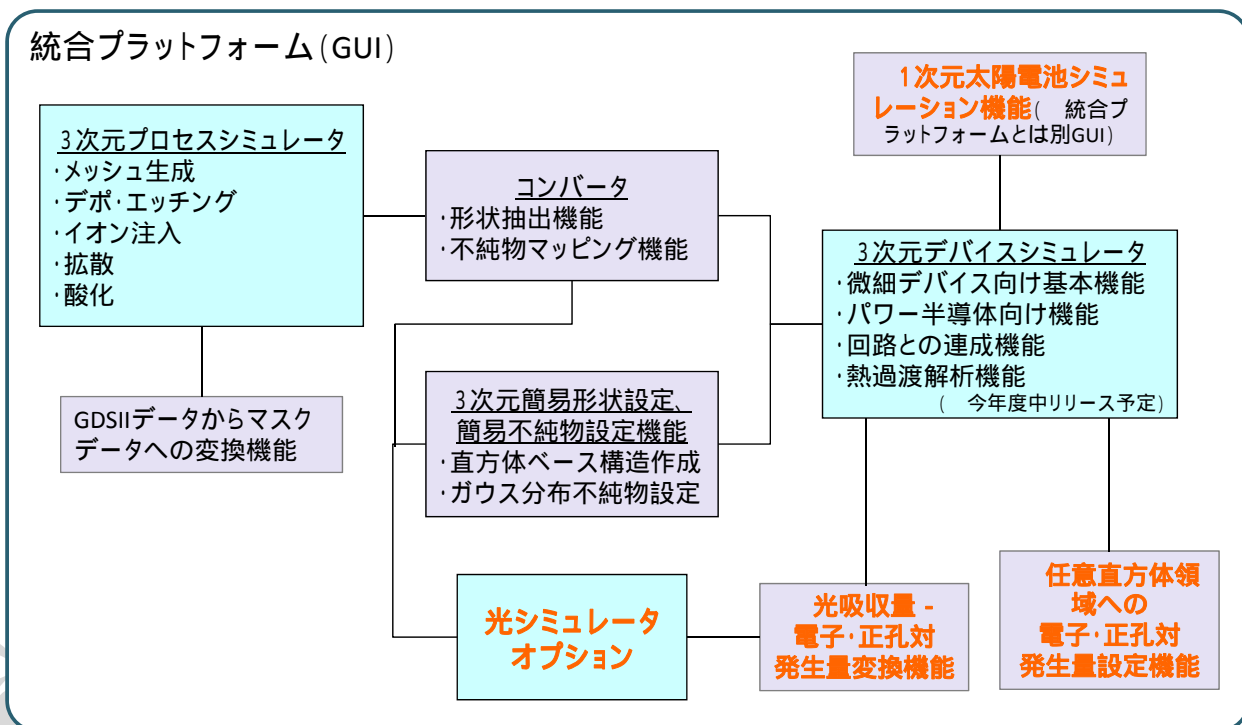
Advance/TCADとは...

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、お客さまのご要望に臨機応変に対応できる国産の3次元TCADシステムです。

特徴

- 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・デバイス計算が可能です。
- 各種の物性値や計算パラメータはユーザにより任意の値が設定可能です。研究から製造までの幅広い用途にご使用いただけます。
- 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ます。

Advance/TCADのシステム構成と 光との連成に関する機能



プロセスシミュレータ機能概要

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ます。

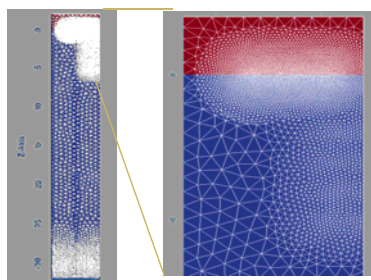
プロセスシミュレータ機能一覧

項目	値
メッシュ作成機能	・格子密度制御機能付き非構造四面体メッシャー
3次元形状生成機能	・テトラメッシュ使用。 ・距離関数を用いた幾何学処理。 ・等方デポ・エッチ、異方デポ・エッチ、平坦化デポ・エッチ。
イオン注入機能	・平均自由行程モデル(アモルファス材質)。 ・原子間相互作用: ZBLポテンシャル。 ・原子・電子間相互作用: LSS、Firsov、VIENNAモデル。 ・熱振動モデル: Debyeモデルによる熱振動振幅。 ・結晶破壊モデル: Kinchin-Peaceモデル。
拡散機能	・非平衡反応拡散モデル。 ・Fermiモデル。
酸化機能	・粘弾性モデルによる酸化 - 変形連成解析機能。

プロセスシミュレータ機能概要

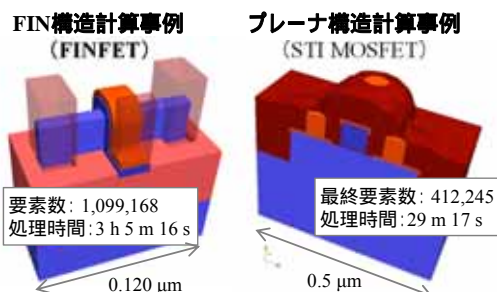
メッシュ作成機能

格子密度制御機能付き非構造四面体を搭載し、複雑な構造を高精度にシミュレーション可能。



形状生成シミュレーション機能

幾何学的な処理による高速な形状生成シミュレーション可能。



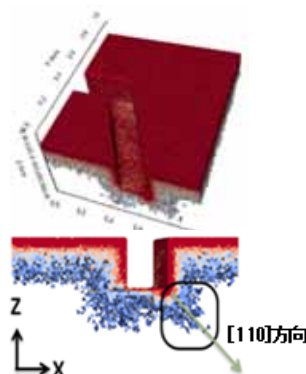
- さまざまなデポジション・エッチング工程を幾何学的な処理により再現し、3次元形状を高速に生成します。
- 複雑な形状表現にも適した非構造四面体メッシュを使用しています。
- 任意形状のマスクパターンが作成可能です。
- 大規模メッシュも高速で処理できます。

プロセスシミュレータ機能概要

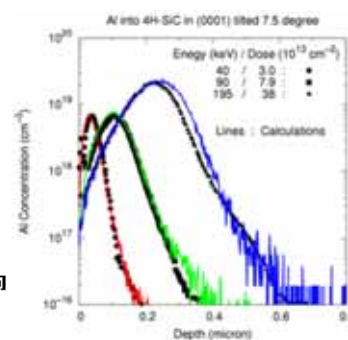
イオン注入機能

- 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。Linux版では並列計算が可能です。一次元深さ方向の密度分布の出力も装備。
- 実験もしくはシミュレーションにより得られた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を搭載。

3次元イオン注入計算事例
(六角トレンチ構造(Si基板))



実験値との比較例
(4H-SiC基板へのAl注入)

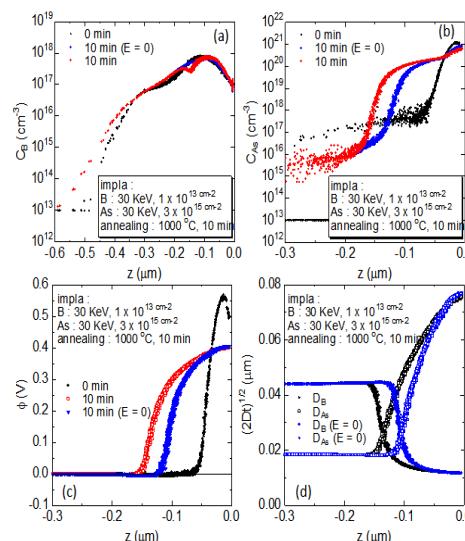


プロセスシミュレータ機能概要

拡散機能

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。

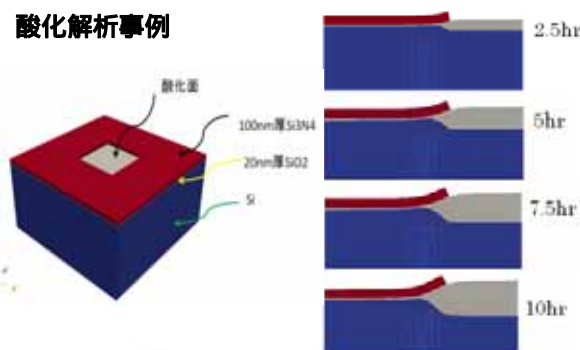
拡散解析事例



酸化機能

粘弾性モデルによる三次元酸化解析機能を搭載 (LOCOS構造対応可)。

酸化解析事例



(a)Asおよび(b)Bの深さ方向の濃度依存性 ($z=0$ がSi-SiO₂界面で $z<0$ はSi領域)、(c)ポテンシャルの深さ(z)依存性(d)拡散長 $(2Dt)^{1/2}$ の深さ(z)依存性

赤丸がFERMIモデルを用いた場合の濃度分布、青丸は電界分布がゼロ ($E=0$) の場合、黒丸は初期分布であるイオン注入計算結果。

デバイスシミュレータ機能概要

デバイスシミュレータは、3次元デバイスの直流・過渡特性を、高速、高精度、ロバストに計算します。大規模計算にも対応しています。対象材料はシリコンの他、化合物系にも対応しています。

項目	値
使用可能な材質 (材料定数を変更することで別材質も設定可能。)	半導体: Si, poly-Si, Ge, Si _x Ge _{1-x} , GaAs, AlAs, Ga _x Al _{1-x} As, 3C-SiC, 4H-SiC, 6H-SiC, GaN, GaAl _x N _{1-x} , AlN 絶縁体: SiO ₂ , Si ₃ N ₄ , Ta ₂ O ₅ , Al ₂ O ₃ , Air 金属: Cu, Al, Ti, Ta, Mo, W, TiN
解析機能	<ul style="list-style-type: none"> 電子・正孔密度の移流拡散方程式 + ポアソン方程式 定常解析、過渡解析機能 不純物モデル(浅い準位から深い準位までに対応) 界面準位モデル(界面再結合, 界面電荷を考慮。連続準位の設定が可能)。 ヘテロ接合に対応。 量子効果補正 (Feynmanの実効ポテンシャル、直接トンネリング) 電極特性 (オーミック, ショットキー接合に対応)。
基本物性のモデル	誘電率、電子親和力、質量モデル、バンドギャップモデルなど
移動度モデル	MOS反転層モデル、折れ線近似、指数飽和型、定数型など
生成・再結合モデル	SRH, Auger, 直接再結合、深い準位による再結合、二準位間再結合、GIDL, 衝突電離など

デバイスシミュレータ機能概要

- ベースとなる材料を基にユーザーによる任意の物性値の設定が可能。
- ワイドギャップ半導体に対応(SiC、 GaNの物性値を装備)。
- 再結合モデルに二準位モデルを採用することで、超低電流でも安定した計算が可能。
- 仮想ライフタイム法、バイアス粗密調整機能を搭載により、所望の印加バイアス値に至るまでを高速計算可能。
- 不完全イオン化不純物に対応。
- 界面の連続準位に対応。
- トンネル電流を考慮したショットキー接合の計算が可能。
- 過渡解析機能を搭載(タイムステップコントロール、任意の入力波形に対応)。
- インバータチェーンなどの複数デバイス一括解析が可能。
- 並列計算を用いた大規模計算が可能(Linux版)。
- 計算手法はガンメル法とカップル法から選択可能。
- 回路解析との連成計算(行列計算レベルで強く連成)。
- 熱過渡解析機能(今年度中にリリース予定)。

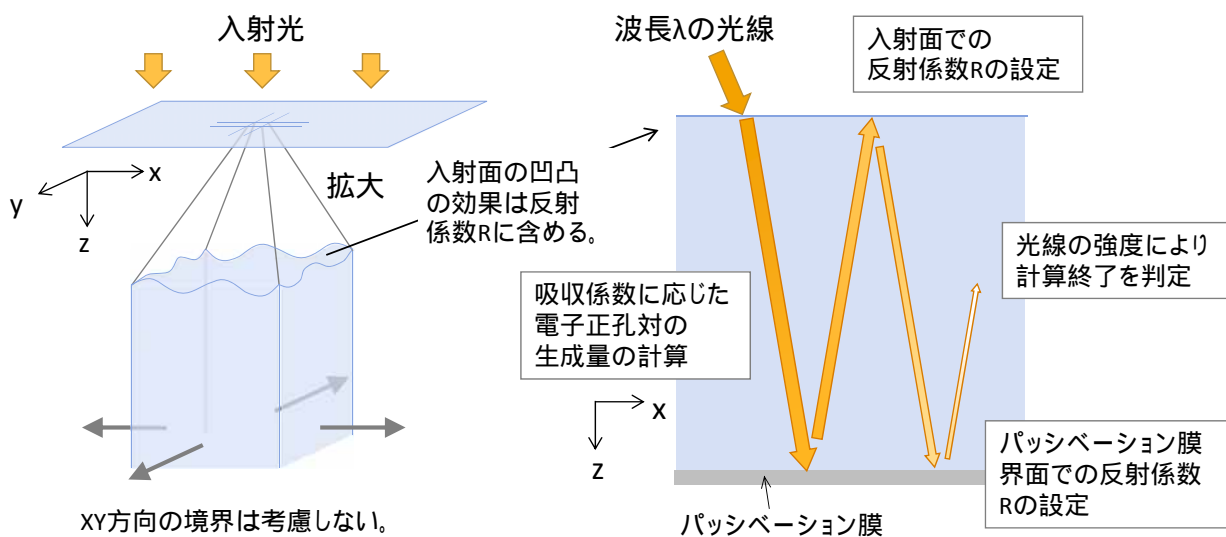
統合プラットフォーム(GUI)機能概要

- プロセス、デバイス、光シミュレータ用パラメータ設定機能。
- プロセス、デバイス、光シミュレータプログラム実行、停止機能。
- プロセス デバイス間のデータコンバータ機能。プロセスシミュレーションの形状、不純物分布をメッシュ系の異なるデバイスシミュレーションで使用するためのデータ変換(コンバータ)機能を搭載。
- 直方体ベースの簡易形状作成機能。
- ガウス分布による不純物設定機能。
- 3次元計算結果描画、解析機能。
- マスクファイル作成エディター機能。
- GDSIIデータからプロセスシミュレーション用マスクファイルへの変換機能。

動作環境

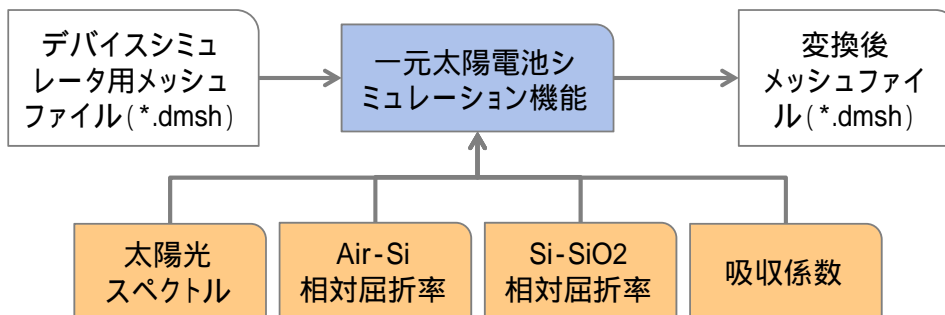
- 統合プラットフォーム、プロセスシミュレータ、デバイスシミュレータは、WindowsとLinuxの両方に対応しています。(Windows7、CentOS6系、CentOS7系での動作実績があります。)
- プロセスシミュレータとデバイスシミュレータのLinux版はMPI(Message Passing Interface)による分散メモリ並列計算が可能です。

光との連成に関する機能 : 1次元太陽電池シミュレーション機能



光との連成に関する機能 : 1次元太陽電池シミュレーション機能

各メッシュ点での電子・正孔対発生量をメッシュファイルに設定



- 制御パラメータ
- 入射面と反射面のZ座標
 - 光の入射角度
 - 計算する波長域
 - 計算終了判定条件

@SPECTRUM	@REFRACTION_AIR_SI	@ABSORPTION
900	900	900
200.0 0.1	200.0 0.378	200.0 2.7888E+8
201.0 0.103	201.0 0.378	201.0 2.7000E+8
202.0 0.106	202.0 0.378	202.0 2.6555E+8
...
1099.0 0.690	1099.0 0.378	1099.0 1.3222E+3

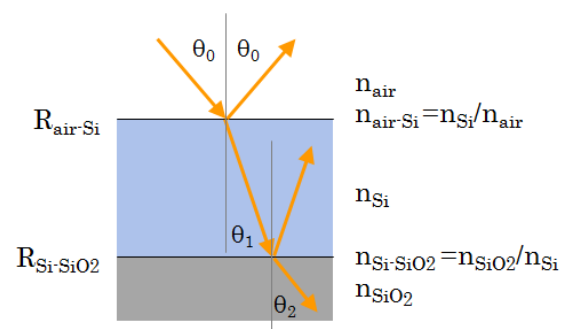
光との連成に関する機能 : 1次元太陽電池シミュレーション機能

入射光線の強度 I_0 、入射角 θ_0 、入射面の反射係数 $R_{\text{air-Si}}$ から、透過直後の強度 I_1 、角度 θ_1 を求める。

吸収係数を α とし光の進行方向を r とすると、光の強度は以下である。

$$I_r = I_{r=0} \exp(-\alpha r)$$

単位体積あたりの吸収エネルギー $-\frac{\partial I}{\partial r} = \alpha I$ が電子正孔対の発生に使用される。



光線が SiO_2 膜に達したときには、角度 θ_1 、 Si-SiO_2 界面の反射係数 $R_{\text{Si-SiO}_2}$ から、反射される光線の強度 I_2 を求める。

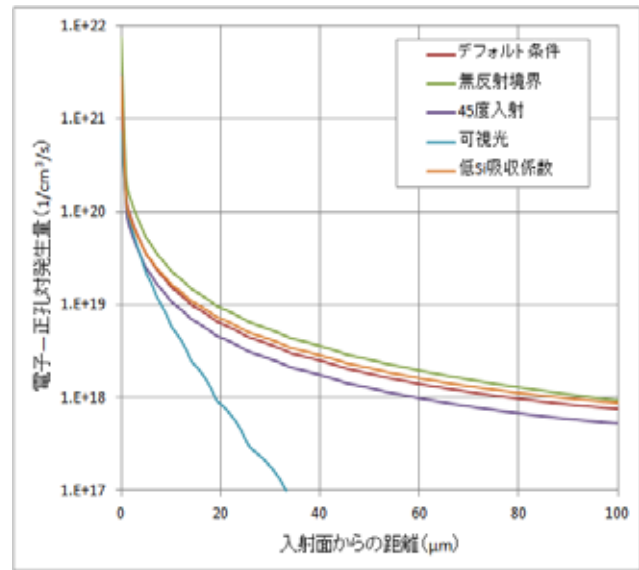
～ を繰り返し、光線の強度がある値以下になったときに、その波長についての計算を終了する。これを各波長について計算する。

光との連成に関する機能 : 1次元太陽電池シミュレーション機能

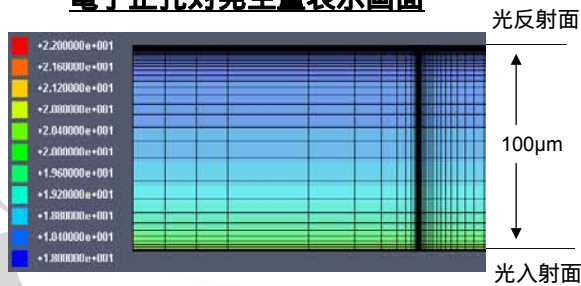
計算パラメータ

特徴	入射光強度	角度	波長域下限 (nm)	波長域上限 (nm)	Air-Si 相対屈折率	Si-SiO ₂ 相対屈折率	Si 吸収係数
デフォルト条件	文献値	0	300	1500	文献値	文献値	文献値
無反射境界	文献値	0	300	1500	全波長域で1.0	全波長域で1.0	文献値
45度入射	文献値	45度	300	1500	文献値	文献値	文献値
可視光	文献値	0	380	750	文献値	文献値	文献値
低Si吸収係数	文献値	0	300	1500	文献値	文献値	全波長域で文献値の0.7倍

電子正孔対発生量

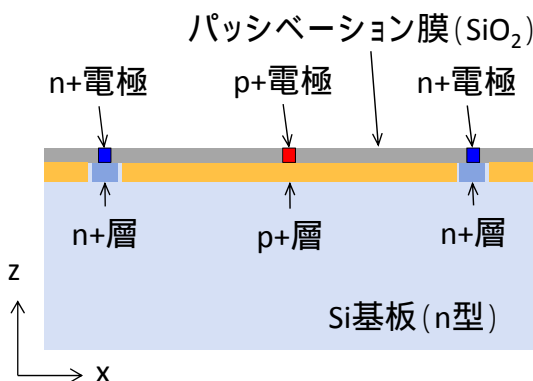


デバイスシミュレータでの 電子正孔対発生量表示画面

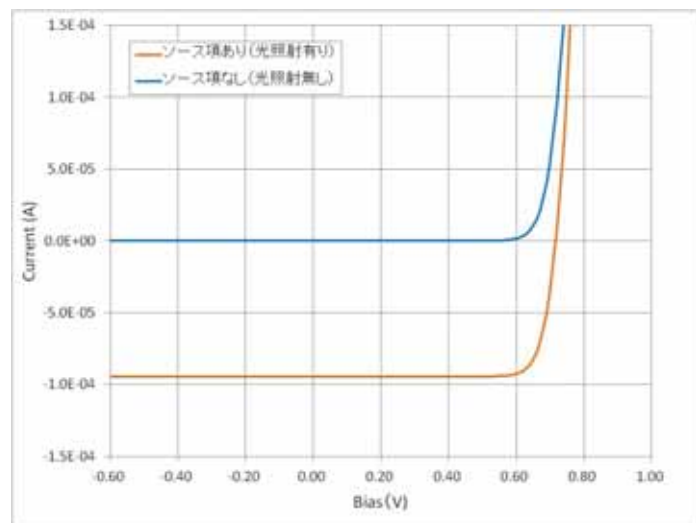


光との連成に関する機能 : 1次元太陽電池シミュレーション機能

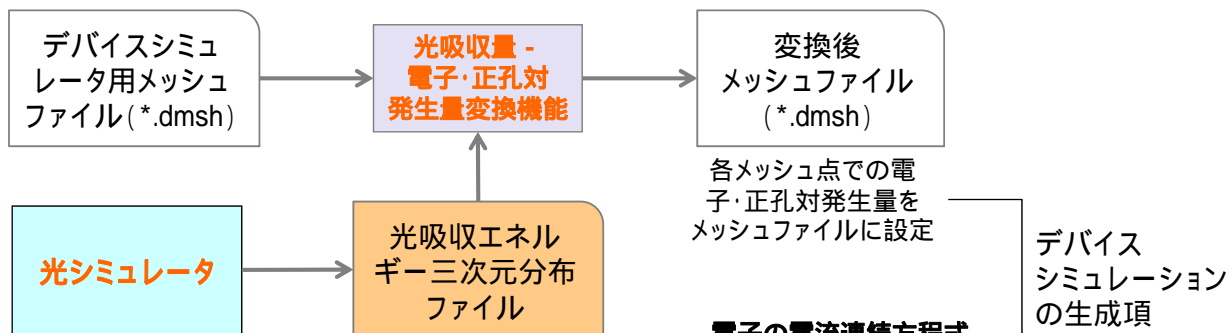
太陽電池モデル模式図



p+電極電流値



光との連成に関する機能 : 光シミュレータとの連成機能



変換した電子・正孔対発生量のメッシュファイルへの設定は、値をそのまま設定するモードと既定値に加算するモードが選択可能。

電子の電流連続方程式

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q} \nabla \cdot \mathbf{J}_n - \text{R} = 0$$

正孔の電流連続方程式

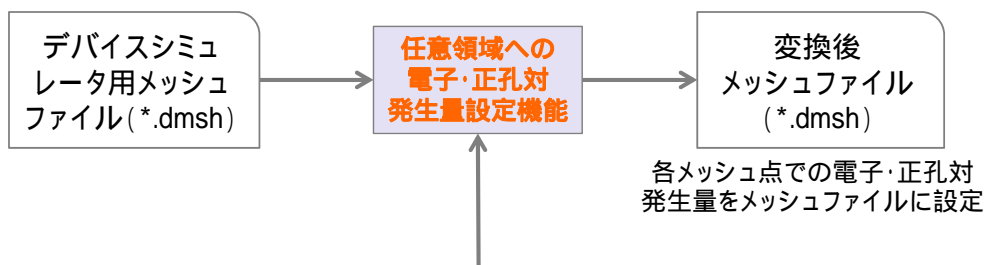
$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{q} \nabla \cdot \mathbf{J}_p - \text{R} = 0$$

ポアソン方程式

$$-\nabla \cdot (\epsilon \nabla \psi) = q(-n + p + N_D - N_A)$$

各メッシュ点での電子・正孔対発生量をメッシュファイルに設定
デバイスシミュレーションの生成項

光との連成に関する機能 : 任意領域への電子・正孔対発生量設定機能



- ユーザーが指定する直方体の領域に、電子・正孔対発生量をメッシュファイルに記述する。
- 電子・正孔対発生量のメッシュファイルへの設定は、値をそのまま設定するモードと既定値に加算するモードが選択可能。



ご清聴ありがとうございました。



光と半導体の連成解析事例

2017年9月21日
アドバンスソフト株式会社
第1事業部 技術第6部
並木 武文、萩原 敦



Copyright © 2017 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

内容

◆ 薄膜太陽電池

Si薄膜太陽電池に波長400～800nmの光を照射し
発生する光電流をシミュレーションする

◆ 垂直色分離型センサー

Si垂直色分離センサーに青、緑、赤の光を照射し
発生する光電流をシミュレーションする



Copyright © 2017 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

◆ 薄膜太陽電池

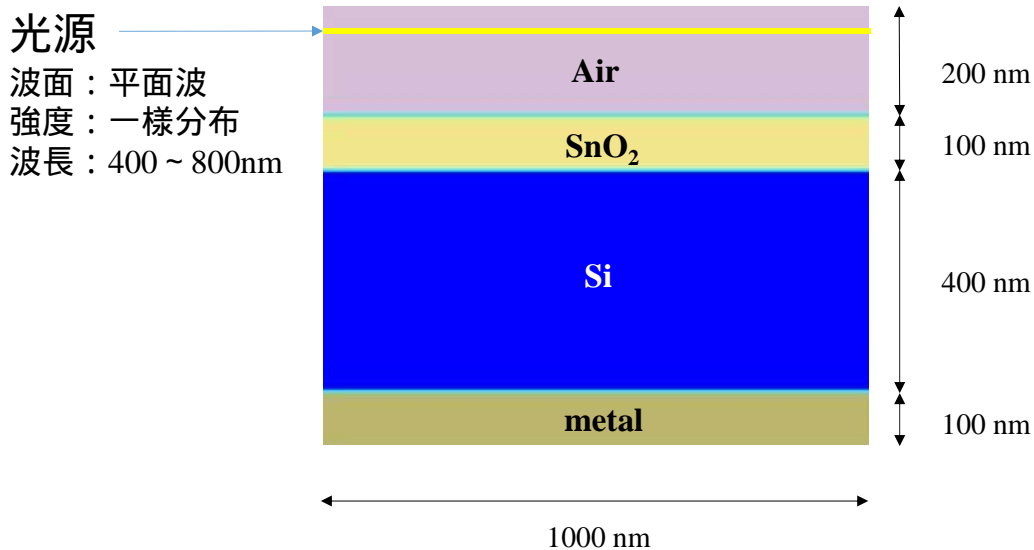
Si薄膜太陽電池に波長400～800nmの光を照射し
発生する光電流をシミュレーションする

◆ 垂直色分離型センサー

Si垂直色分離センサーに青、緑、赤の光を照射し
発生する光電流をシミュレーションする



計算モデル (光シミュレーション用)

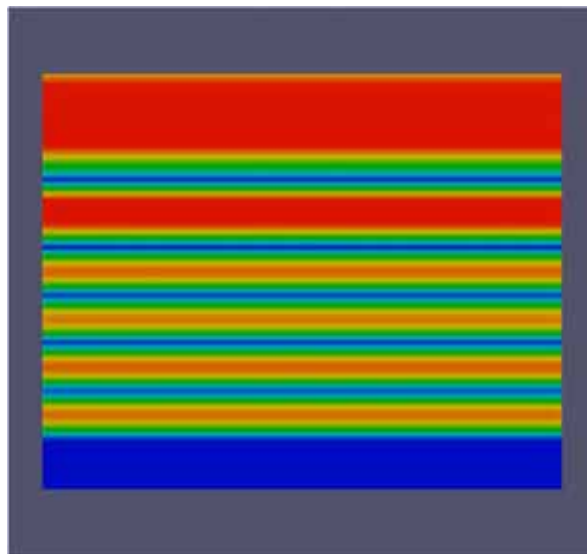
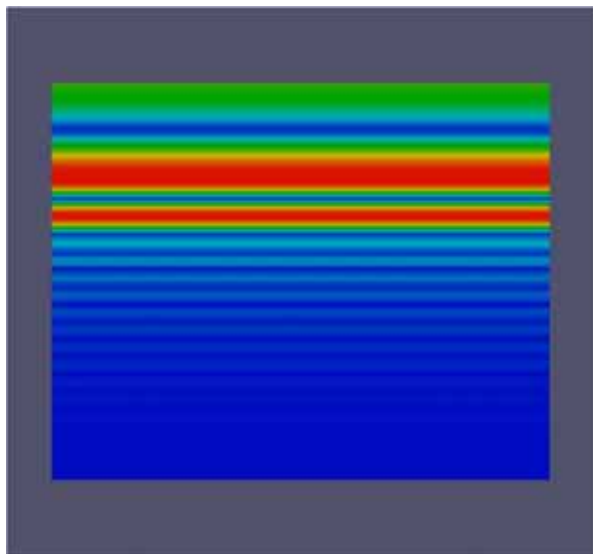


領域終端の境界条件
垂直方向：吸収境界
水平方向：周期境界

奥行き 200 nm



光の伝搬（電界の時系列データ）

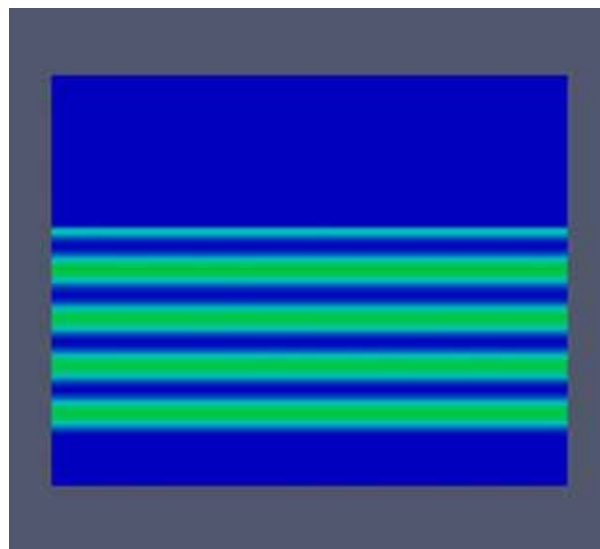
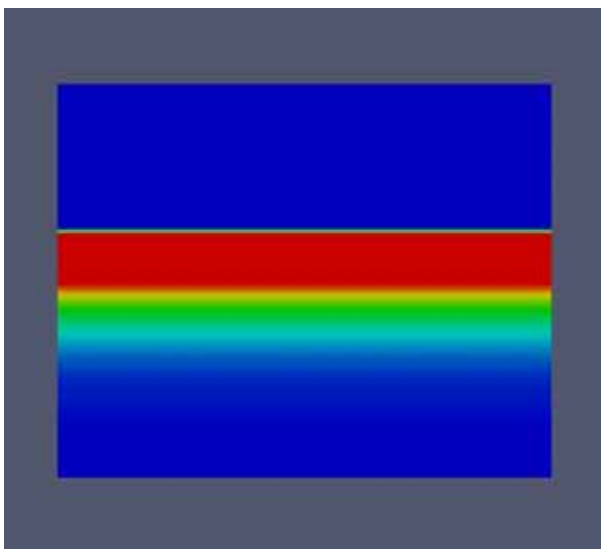


λ	400 nm
n	5.570
k	0.387

λ	700 nm
n	3.778
k	0.012

λ : 光の波長、 n : Si の屈折率、 k : Si の消衰係数

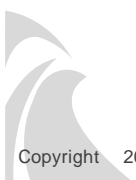
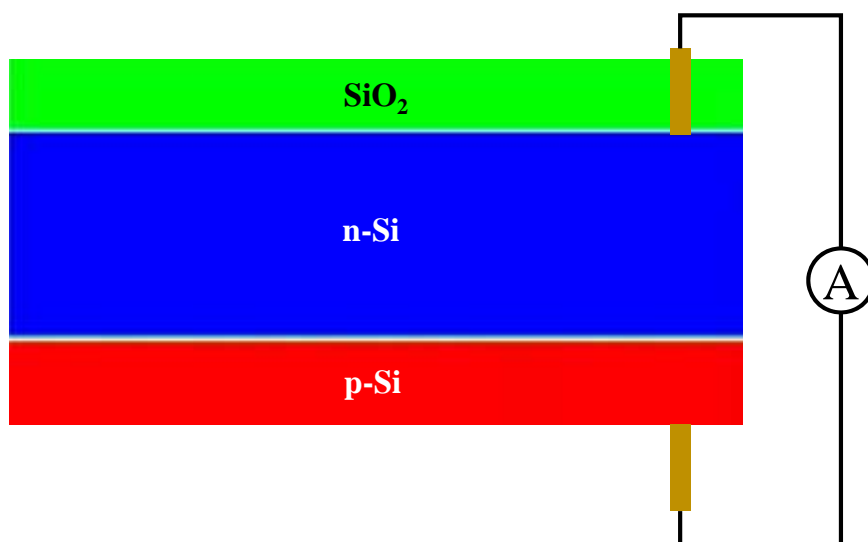
光の吸収分布（定常値）



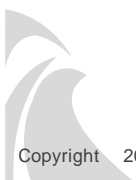
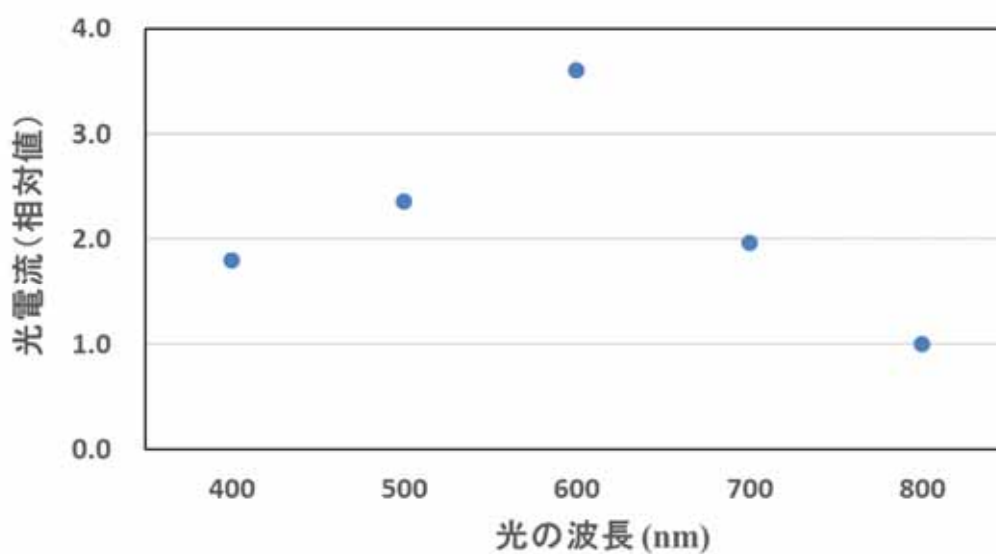
λ	400 nm
n	5.570
k	0.387

λ	700 nm
n	3.778
k	0.012

λ : 光の波長、 n : Si の屈折率、 k : Si の消衰係数

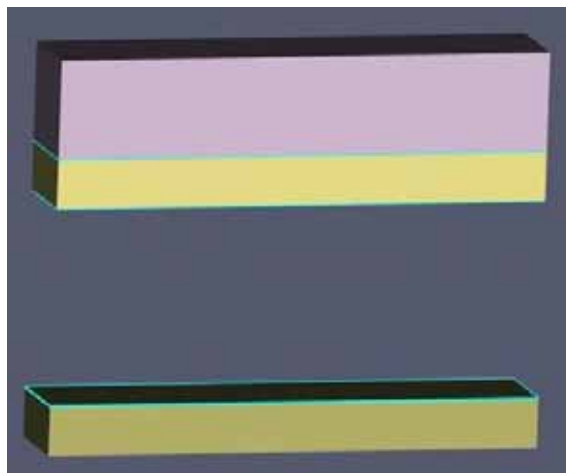


発生した光電流

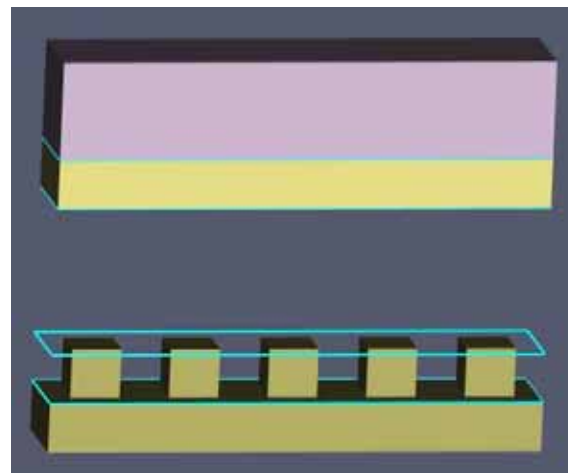


計算モデル（光シミュレーション用）

Si を非表示としている



平坦な金属のモデル（前述のモデル）



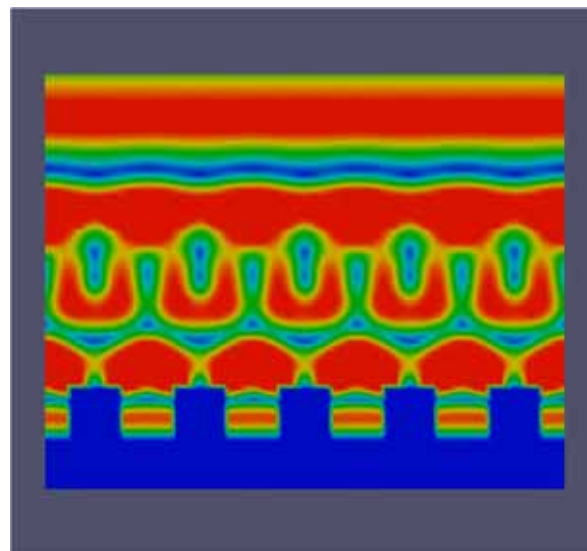
凹凸のある金属のモデル



光の伝搬（電界の時系列データ）



平坦な金属のモデル（前述のモデル）

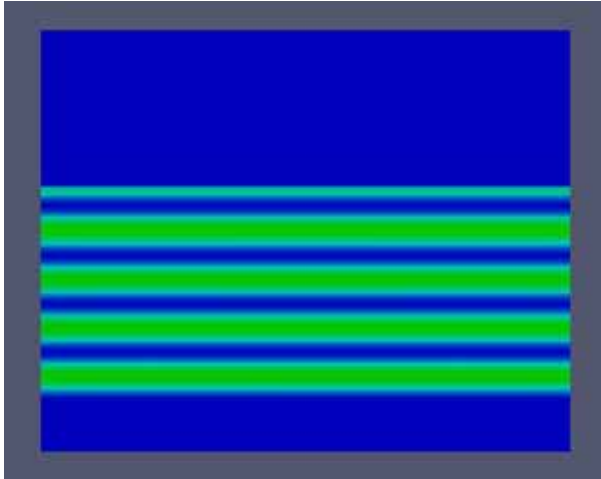


凹凸のある金属のモデル

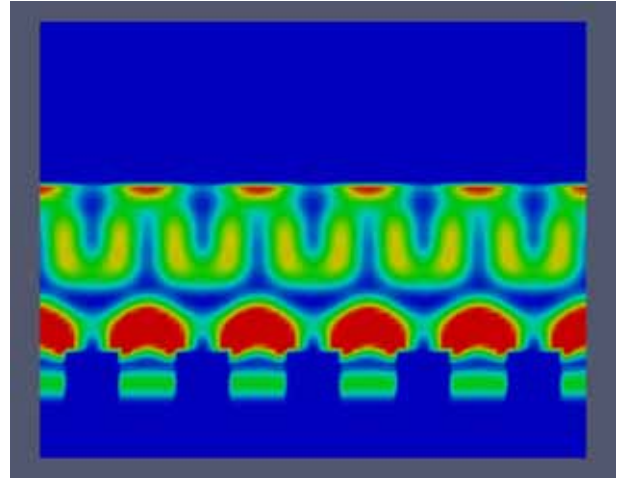
波長700 nmの場合



光の吸収分布（定常値）



平坦な金属のモデル（前述のモデル）

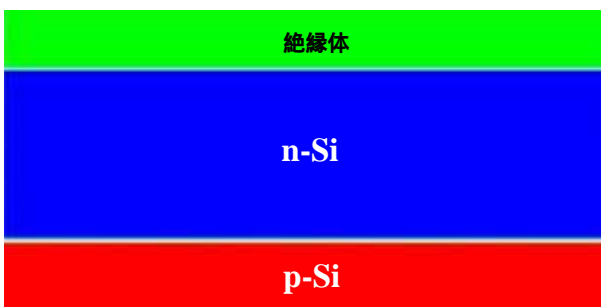


凹凸のある金属のモデル

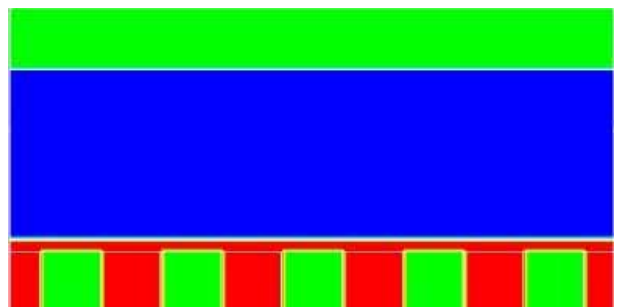
波長700 nmの場合



計算モデル（デバイスシミュレーション用）

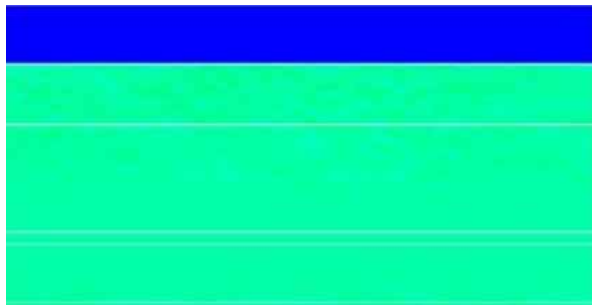


平坦な金属のモデル（前述のモデル）

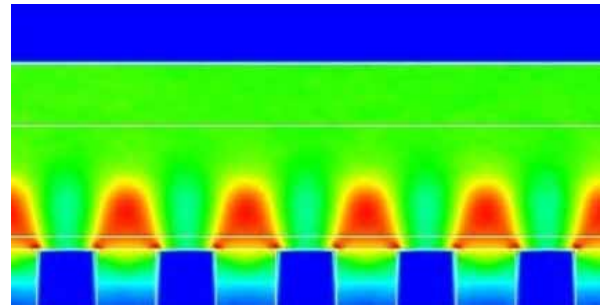


凹凸のある金属のモデル



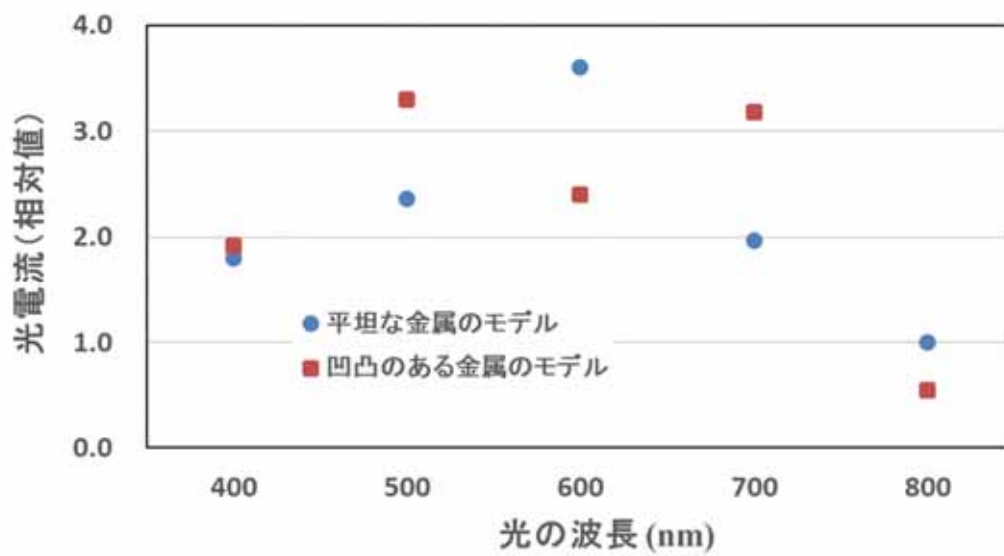


平坦な金属のモデル (前述のモデル)



凹凸のある金属のモデル

波長700 nmの場合



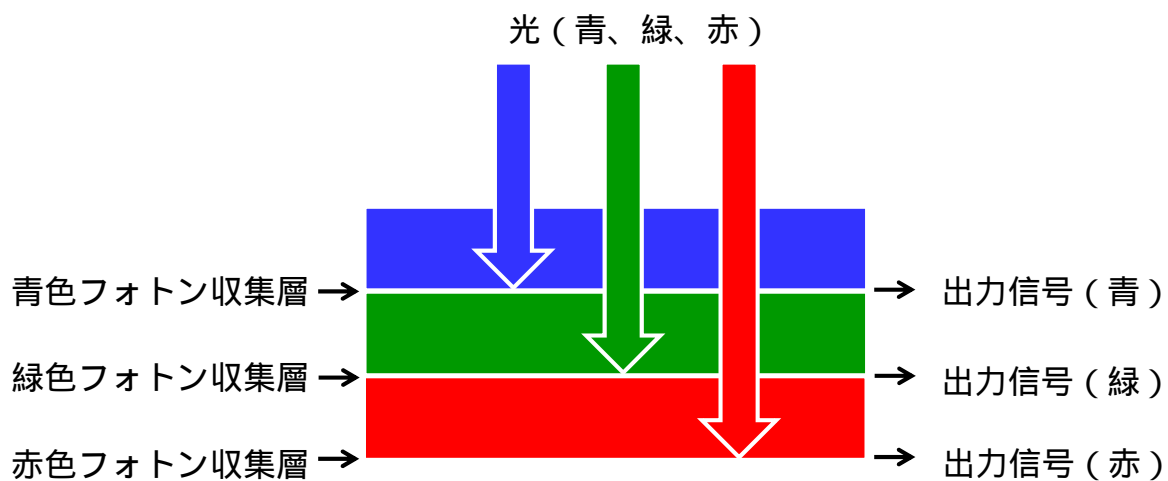
◆ 薄膜太陽電池

Si薄膜太陽電池に波長400～800nmの光を照射し
発生する光電流をシミュレーションする

◆ 垂直色分離型センサー

Si垂直色分離センサーに青、緑、赤の光を照射し
発生する光電流をシミュレーションする

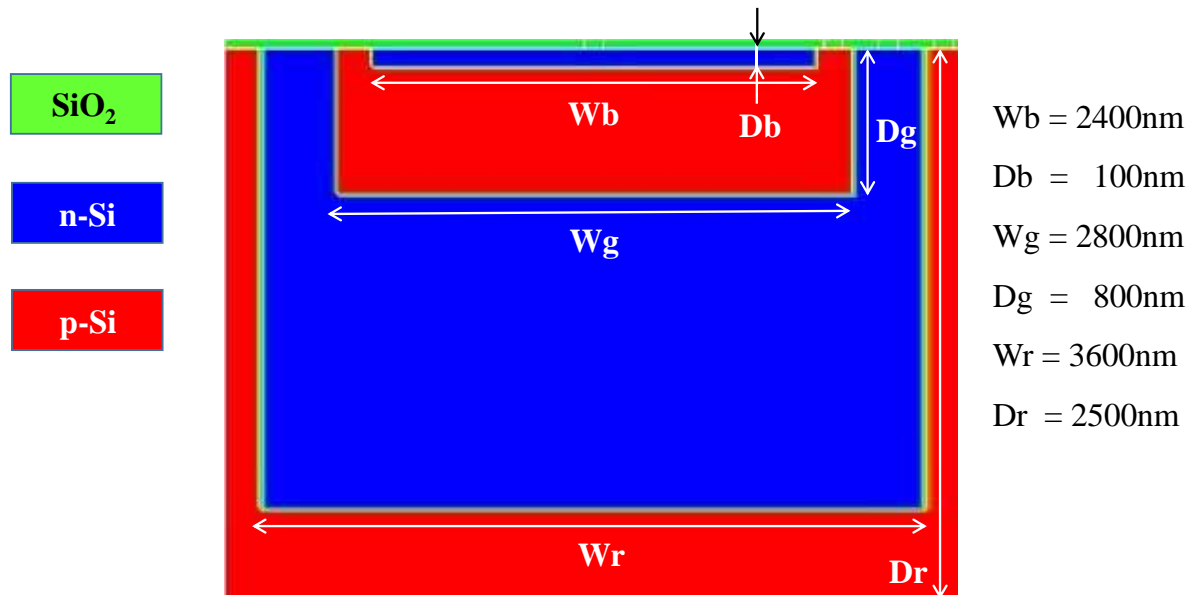
垂直色分離型センサーの原理



計算モデル (デバイスシミュレーション用)



<http://www.advancesoft.jp/>



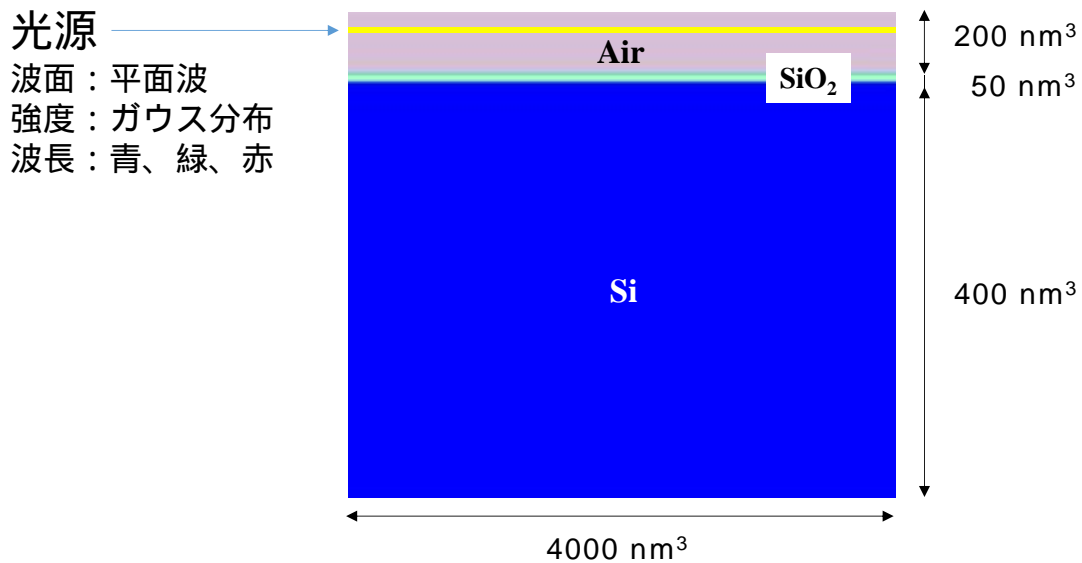
17

Copyright © 2017 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

計算モデル (光シミュレーション用)



<http://www.advancesoft.jp/>



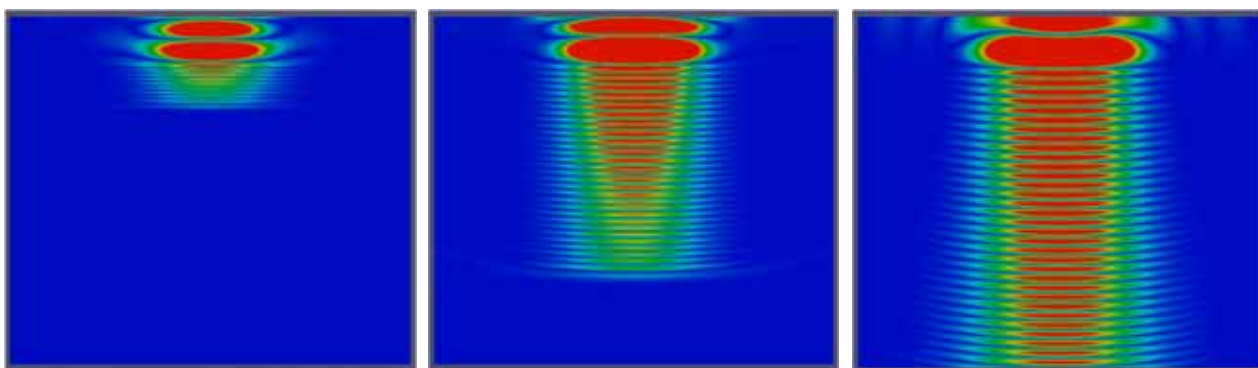
領域終端の境界条件
 垂直方向：吸収境界
 水平方向：周期境界

奥行き 4000 nm^3

18

Copyright © 2017 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

光の伝搬（電界の時系列データ）



青色光

緑色光

赤色光

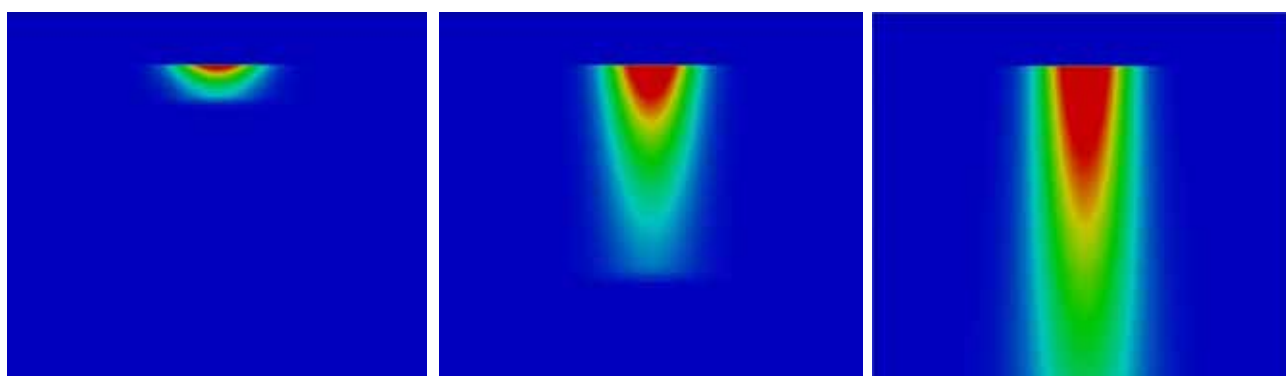
λ	437 nm
n	4.831
k	0.185

λ	546 nm
n	4.089
k	0.044

λ	700 nm
n	3.778
k	0.012

λ : 光の波長、 n : Si の屈折率、 k : Si の消衰係数

光の吸収分布（定常値）



青色光

緑色光

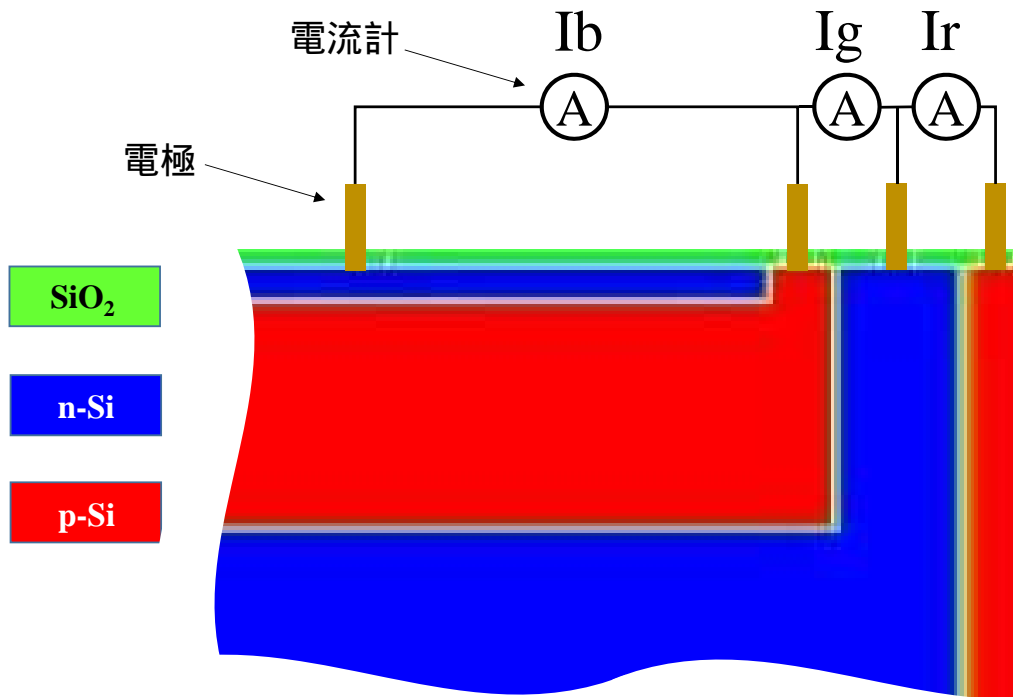
赤色光

λ	437 nm
n	4.831
k	0.185

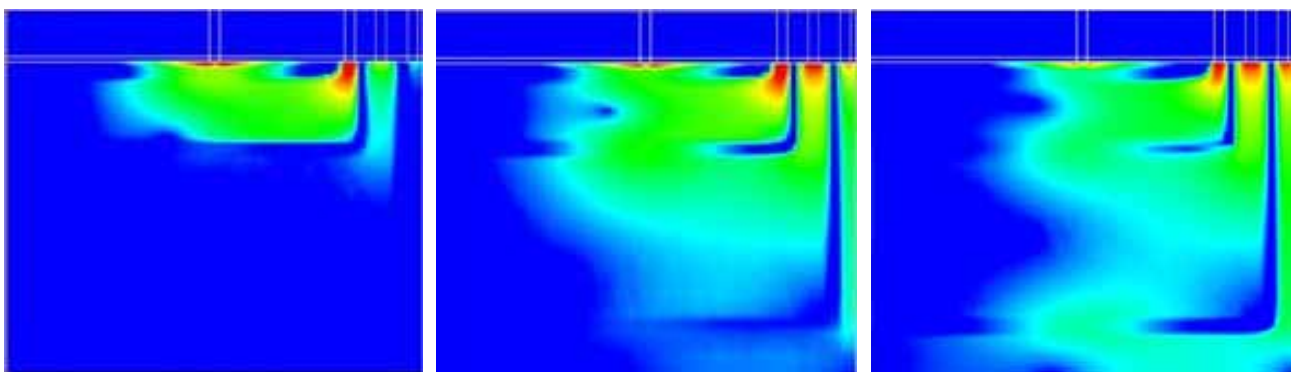
λ	546 nm
n	4.089
k	0.044

λ	700 nm
n	3.778
k	0.012

λ : 光の波長、 n : Si の屈折率、 k : Si の消衰係数



Si内部の電流密度と発生した光電流



青色光

緑色光

赤色光

Ib	3.800×10^{-17}
Ig	0.180×10^{-17}
Ir	0.012×10^{-17}

Ib	2.300×10^{-17}
Ig	2.600×10^{-17}
Ir	0.640×10^{-17}

Ib	0.770×10^{-17}
Ig	1.500×10^{-17}
Ir	1.500×10^{-17}



Copyright © 2017 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

電磁波解析ソフトウェア Advance/ParallelWaveの 要素技術

2017年9月21日
アドバンスソフト株式会社
第1事業部 技術第6部
並木 武文



Copyright © 2017 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

概要

- ◆ 境界条件
- ◆ 光源
- ◆ データ出力
- ◆ 分散性媒質
- ◆ 並列計算性能



Copyright © 2017 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

FDTD法は閉領域型解法（解析領域が有限）のため
解析領域終端面に適切な境界条件の設定が必要

- ◆ 完全導体境界条件
- ◆ 周期境界条件
- ◆ 吸収境界条件



完全導体境界条件

- ◆ 電氣的完全導体境界条件

$$E_{//} = 0 \quad E_{//} : \text{境界面上の電界の接線成分}$$

電氣的に対称な鏡像を形成する
電磁波は表面で完全反射される

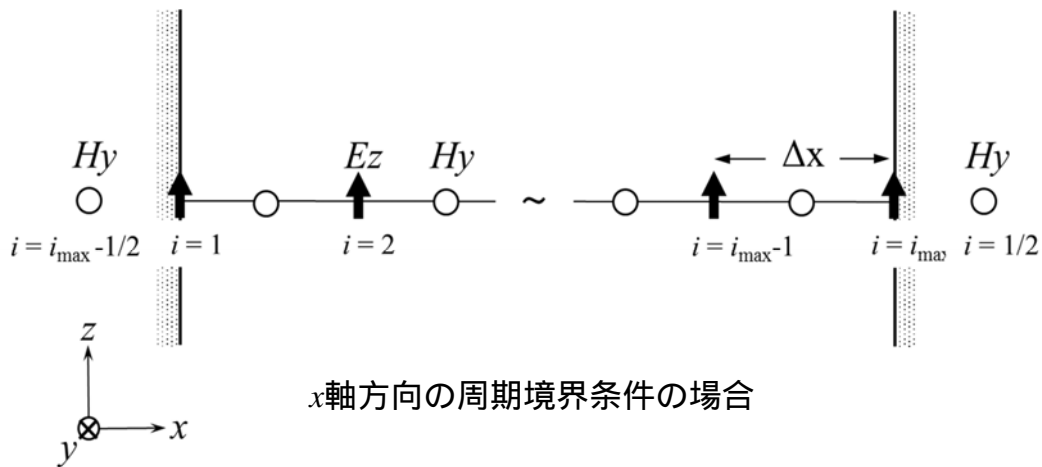
- ◆ 磁氣的完全導体境界条件

$$H_{//} = 0 \quad H_{//} : \text{境界面上の磁界の接線成分}$$

電氣的に反対称な鏡像を形成する
解析対象の対称性を利用して解析領域を低減できる



解析領域が座標軸方向に周期的に続く状態を形成する



x軸方向の周期境界条件の場合

終端面上にある電界 $E_z (i=1)$ および $E_z (i=i_{\max})$ を更新する際、それらの外側にそれぞれ $H_y (i=i_{\max} - 1/2)$ と $H_y (i=1/2)$ があるものとして計算する

◆ 解析的吸収境界条件

近似的に領域終端で反射しないような微分方程式を用いる

考案者：Mur、Higdon、Liaoなど



Murの1次の吸収境界条件を採用

◆ 媒質的吸収境界条件

領域終端の外側に仮想的な損失性媒質を設定する

考案者：Rappaport、Berengerなど



BerengerのPML吸収境界条件を採用

Murの1次の吸収境界条件

x方向に伝搬する平面波が 終端面に垂直に入射すると仮定

$$\frac{\partial E_z}{\partial x} - \frac{1}{v} \frac{\partial E_z}{\partial t} = 0$$

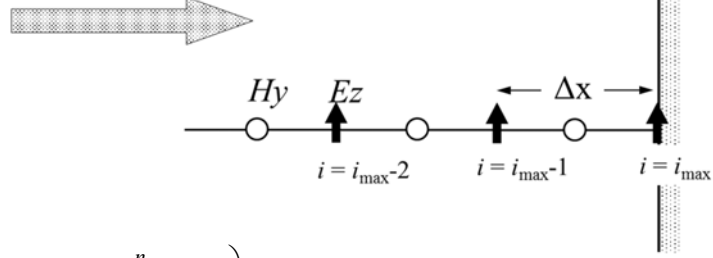


$$\left(\frac{E_{z,i_{\max}}^{n+1/2} - E_{z,i_{\max}-1}^{n+1/2}}{\Delta x} \right) - \frac{1}{v} \cdot \left(\frac{E_{z,i_{\max}-1/2}^{n+1} - E_{z,i_{\max}-1/2}^n}{\Delta t} \right) = 0$$



$$E_{z,i_{\max}}^{n+1} = E_{z,i_{\max}-1}^n + \frac{v\Delta t + \Delta x}{v\Delta t - \Delta x} (E_{z,i_{\max}-1}^{n+1} - E_{z,i_{\max}}^n)$$

X方向に伝搬する平面波



$$E_{z,i}^{n+1/2} = \frac{E_{z,i}^{n+1} + E_{z,i}^n}{2}$$

$$E_{z,i-1/2}^n = \frac{E_{z,i}^n + E_{z,i-1}^n}{2}$$

PML吸収境界条件

PMLとは...

解析領域終端の外側に設定する仮想的な吸収媒質領域
内部の電磁界をサブコンポーネントに分離して計算

$$E_x = E_{xy} + E_{xz}$$

E_{xy} は E_x のy方向に伝搬する成分
 E_{xz} は E_x のz方向に伝搬する成分

$$E_y = E_{yz} + E_{yx}$$

$$E_z = E_{zx} + E_{zy}$$

$$H_x = H_{xy} + H_{xz}$$

H_{xy} は H_x のy方向に伝搬する成分
 H_{xz} は H_x のz方向に伝搬する成分

$$H_y = H_{yz} + H_{yx}$$

$$H_z = H_{zx} + H_{zy}$$

各サブコンポーネントについて解くべき方程式

σ^* は導磁率(磁気伝導率)

$$\varepsilon \frac{\partial E_{xy}}{\partial t} + \sigma_y E_{xy} = \frac{\partial H_x}{\partial y}$$

$$\mu \frac{\partial H_{xy}}{\partial t} + \sigma_y^* H_{xy} = -\frac{\partial E_z}{\partial y}$$

$$\varepsilon \frac{\partial E_{xz}}{\partial t} + \sigma_z E_{xz} = -\frac{\partial H_y}{\partial z}$$

$$\mu \frac{\partial H_{xy}}{\partial t} + \sigma_y^* H_{xy} = -\frac{\partial E_z}{\partial y}$$

$$\varepsilon \frac{\partial E_{yz}}{\partial t} + \sigma_z E_{yz} = \frac{\partial H_x}{\partial z}$$

$$\mu \frac{\partial H_{yz}}{\partial t} + \sigma_z^* H_{yz} = -\frac{\partial E_x}{\partial z}$$

$$\varepsilon \frac{\partial E_{yx}}{\partial t} + \sigma_x E_{yx} = -\frac{\partial H_z}{\partial x}$$

$$\mu \frac{\partial H_{yx}}{\partial t} + \sigma_x^* H_{yx} = \frac{\partial E_z}{\partial x}$$

$$\varepsilon \frac{\partial E_{zx}}{\partial t} + \sigma_x E_{zx} = \frac{\partial H_y}{\partial x}$$

$$\mu \frac{\partial H_{zx}}{\partial t} + \sigma_x^* H_{zx} = -\frac{\partial E_y}{\partial x}$$

$$\varepsilon \frac{\partial E_{zy}}{\partial t} + \sigma_y E_{zy} = -\frac{\partial H_x}{\partial y}$$

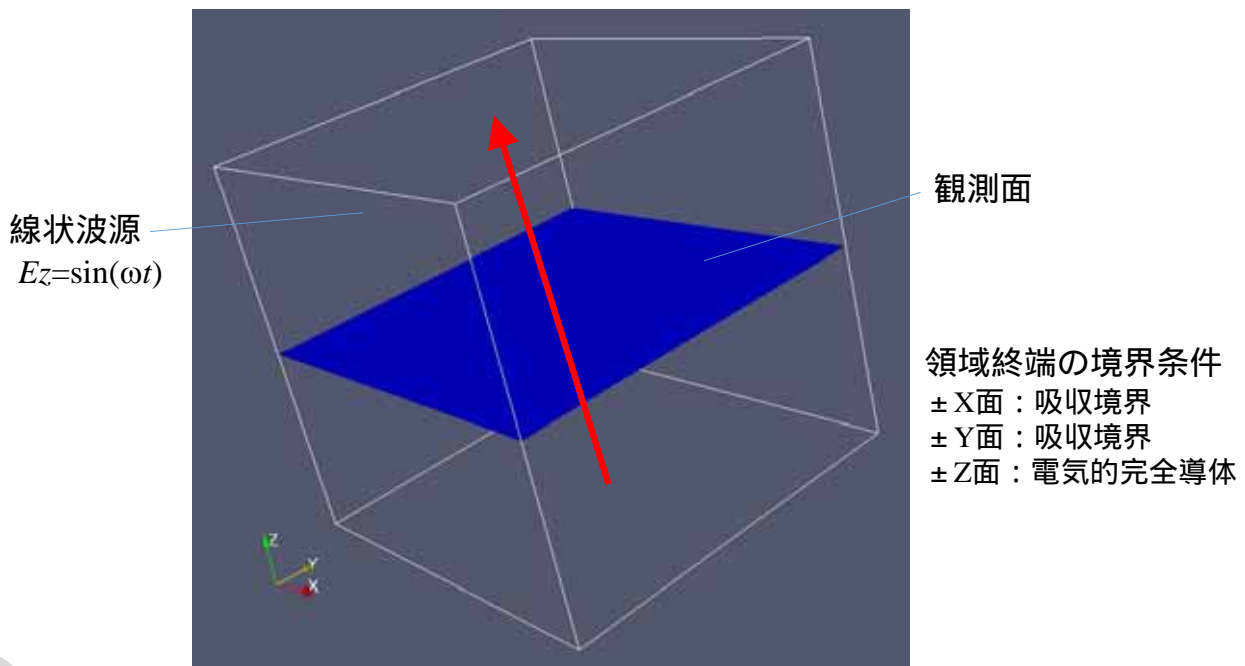
$$\mu \frac{\partial H_{zy}}{\partial t} + \sigma_y^* H_{zy} = \frac{\partial E_x}{\partial y}$$

解析領域内部とPMLとの波動インピーダンスの整合条件

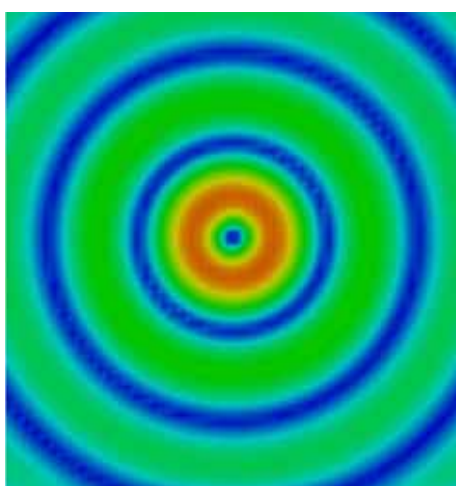
$$\frac{\sigma_x}{\varepsilon} = \frac{\sigma_x^*}{\mu} \quad \frac{\sigma_y}{\varepsilon} = \frac{\sigma_y^*}{\mu} \quad \frac{\sigma_z}{\varepsilon} = \frac{\sigma_z^*}{\mu}$$

- ◆ 整合条件を満たすことにより、電磁波は理論上、
その周波数や入射角に依存せずに
解析領域内部からPMLへ無反射で入射する
- ◆ PMLに入射した電磁波は、 σ と σ^* を含む方程式により
急速に減衰する

吸収境界条件の比較

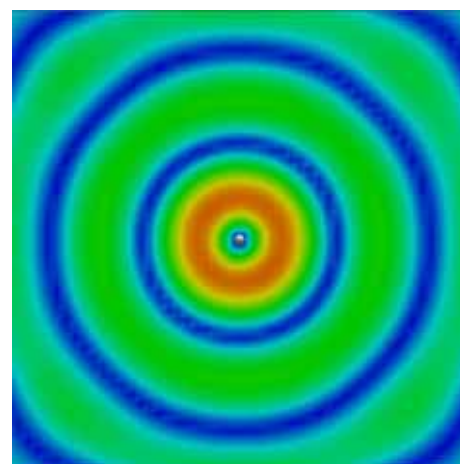


吸収境界条件の比較



PML(8層)

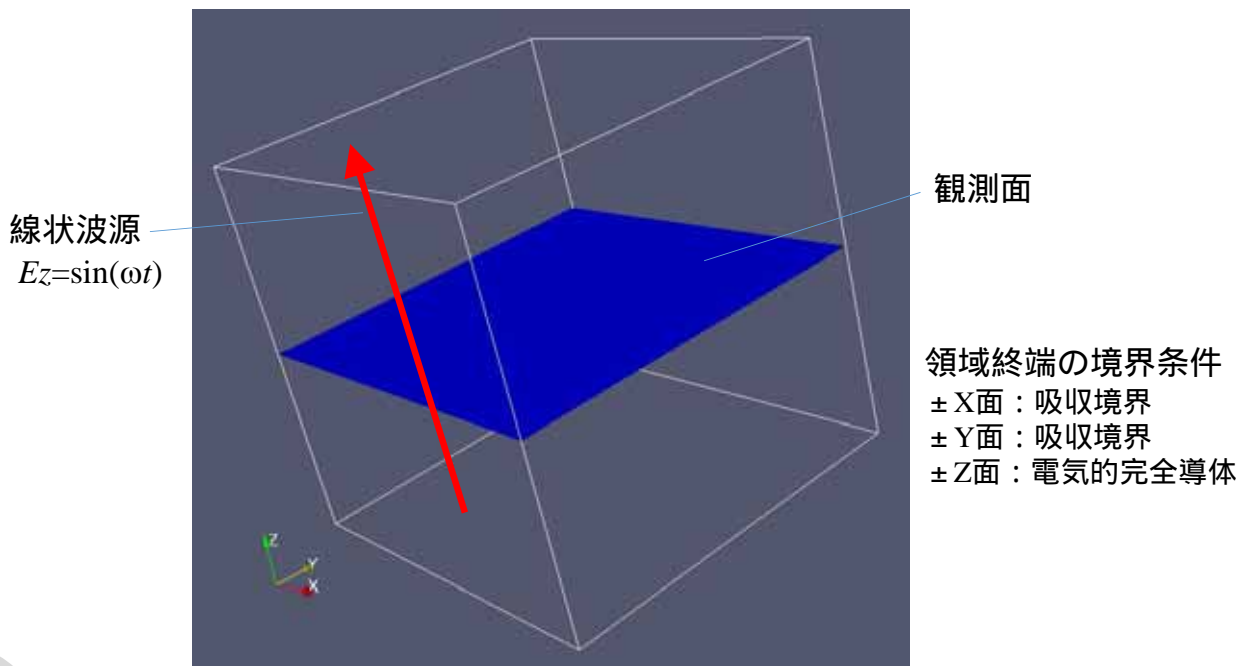
領域終端で電磁波は良好に吸収され
同心円状の界分布が確認できる



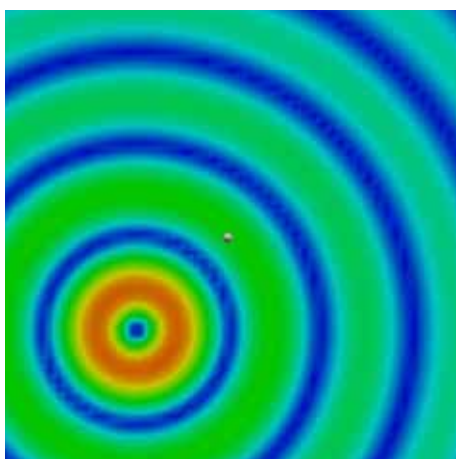
Mur(1st-order)

領域終端からの反射波により同心円が
若干乱れている

吸収境界条件の比較

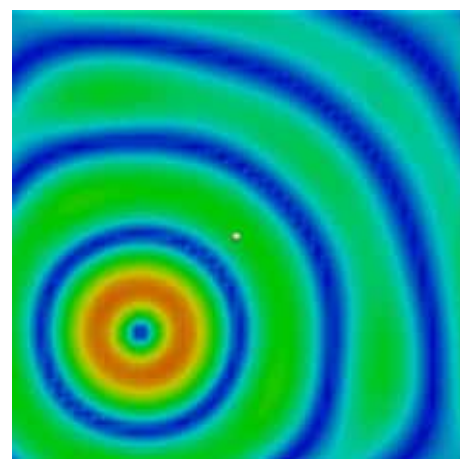


吸収境界条件の比較



PML(8層)

領域終端で電磁波は良好に吸収され
同心円状の界分布が確認できる



Mur(1st-order)

領域終端からの反射波により同心円が
大きく乱れている

解析領域内に設定した面上の電界に時間変動を与えると面の法線方向に光が発生し伝搬する

◆ 波形

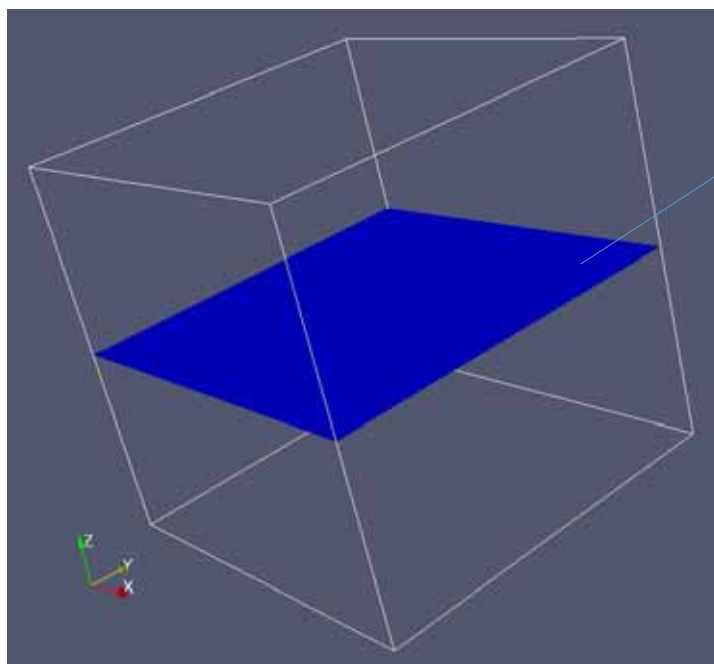
電界の時間変動を正弦波で与える

$$E(t) = E_w \sin(\omega t) \quad w = x, y \quad (\text{光源は}xy\text{面と仮定})$$

E_w : 電界の振幅、 t : 時刻、 ω : 角周波数
 E_x と E_y に位相差を設定することで円偏光も発生可能

◆ 強度分布

一様分布とガウス分布を設定可能
(ガウス分布の場合は、 x 方向と y 方向のガウス幅を設定する)

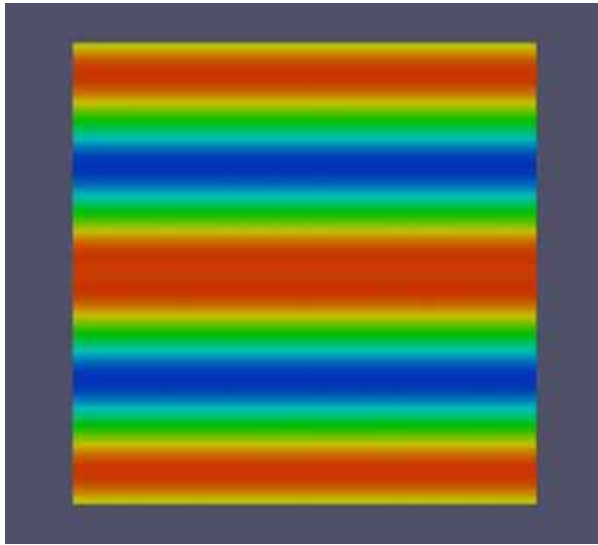


面状光源

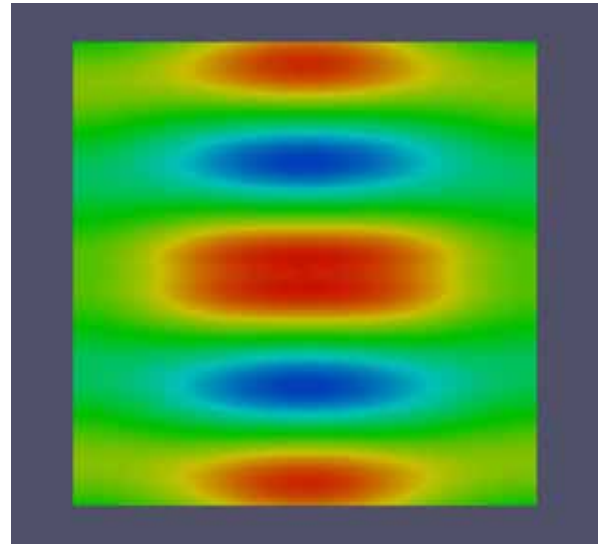
領域終端の境界条件

- ± X面 : 周期境界
- ± Y面 : 周期境界
- ± Z面 : 吸収境界

X面内の電界変動



強度分布：一様分布



強度分布：ガウス分布

データ出力

時間的に正弦波振動する電界Eの定常解

$$E(r, \omega) = \frac{1}{T} \int_0^T \{ E(r, t) e^{-j\omega t} \} dt$$

r : 座標、 ω : 角周波数、

T : 正弦波の周期、 Δt : 時間刻み幅



$$E(r, \omega) = \frac{1}{T} \sum_{n=0}^N \{ E(r, t) e^{-j\omega n \Delta t} \} \quad (N = T/\Delta t)$$

◆ 光強度

$$|E(r, \omega)|^2$$

◆ 光吸収 (光損失)

$$\sigma |E(r, \omega)|^2 \quad (\sigma = 2nk\omega \varepsilon_0)$$

σ : 導電率、 ε_0 : 真空の誘電率、

n : 屈折率、 k : 消衰係数

◆ 電界の時系列値

全解析領域または指定した面や点における電界の時系列値

媒質の誘電率や導電率が周波数に依存する場合、
時間領域の解析では特別な対応が必要

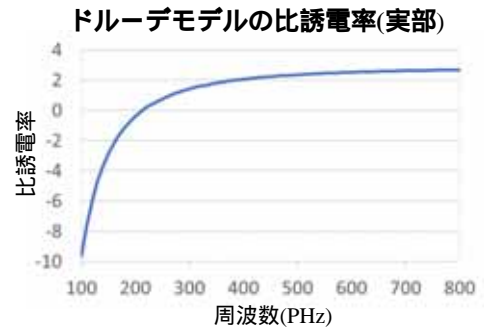
$$\frac{\partial \vec{D}(r, \omega)}{\partial t} = \text{rot } \vec{H}(r, \omega) \quad \vec{D}(r, \omega) = \epsilon \vec{E}(r, \omega) + \vec{P}(r, \omega) \quad D: \text{電束密度、} P: \text{分極}$$

◆ ドルーデモデル

$$\vec{P}(r, \omega) = \epsilon_0 \frac{\omega_p^2}{-\omega^2 + j\omega\Gamma} \vec{E}(r, \omega)$$

◆ ローレンツモデル

$$\vec{P}(r, \omega) = \epsilon_0 \frac{\chi_0 \omega_0^2}{-\omega^2 + j\omega\Gamma + \omega_0^2} \vec{E}(r, \omega)$$



負の誘電率の媒質(金属)の
計算が可能になる

ドルーデモデルの定式化

$$(-\omega^2 + j\omega\Gamma) \vec{P}(r, \omega) = \epsilon_0 \omega_p^2 \vec{E}(r, \omega) \quad \text{周波数領域}$$

$$\Downarrow \quad -\omega^2 \Rightarrow \frac{\partial^2}{\partial t^2} \quad j\omega \Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} \quad \Downarrow$$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} + \Gamma \frac{\partial}{\partial t} \right) \vec{P}(r, t) = \epsilon_0 \omega_p^2 \vec{E}(r, t) \quad \text{時間領域}$$



$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \Gamma \right) \vec{J}(r, t) = \epsilon_0 \omega_p^2 \vec{E}(r, t) \quad \vec{J}(r, t) = \frac{\partial}{\partial t} \vec{P}(r, t) \quad J: \text{分極電流}$$



$$\begin{aligned} J_{(i+1/2, j+1/2, k+1/2)}^{n+1/2} &= \frac{2-\Gamma\Delta t}{2+\Gamma\Delta t} J_{(i+1/2, j+1/2, k+1/2)}^{n-1/2} \\ &+ \frac{2\Delta t}{2+\Gamma\Delta t} \cdot \epsilon_0 \omega_p^2 \left(E_{(i+1/2, j, k)}^n + E_{(i+1/2, j+1, k)}^n + E_{(i+1/2, j, k+1)}^n + E_{(i+1/2, j+1, k+1)}^n \right) \end{aligned}$$

$$\frac{\partial \vec{D}(r, \omega)}{\partial t} = \text{rot } \vec{H}(r, \omega)$$



$$\varepsilon \frac{\partial}{\partial t} \vec{E}(r, t) + \vec{J}(r, t) = \text{rot } \vec{H}(r, t)$$



$$\begin{aligned} Ex_{(i+1/2, j, k)}^{n+1} &= Ex_{(i+1/2, j, k)}^n \\ &+ \frac{\Delta t}{\varepsilon_{(i, j, k)}} \cdot \left(\frac{Hz_{(i+1/2, j+1/2, k)}^{n+1/2} - Hz_{(i+1/2, j-1/2, k)}^{n+1/2}}{\Delta y^{(j)}} - \frac{Hy_{(i+1/2, j, k+1/2)}^{n+1/2} - Hy_{(i+1/2, j, k-1/2)}^{n+1/2}}{\Delta z^{(k)}} \right) \\ &- \frac{1}{4} \frac{\Delta t}{\varepsilon_{(i, j, k)}} \cdot \left(Jx_{(i+1/2, j+1/2, k+1/2)}^{n+1/2} + Jx_{(i+1/2, j-1/2, k+1/2)}^{n+1/2} + Jx_{(i+1/2, j+1/2, k-1/2)}^{n+1/2} + Jx_{(i+1/2, j-1/2, k-1/2)}^{n+1/2} \right) \end{aligned}$$



(1) 磁界の更新

$$\begin{aligned} Hx_{(i, j+1/2, k+1/2)}^{n+1/2} &= Hx_{(i, j+1/2, k+1/2)}^{n-1/2} + \frac{\Delta t}{\mu} \cdot \\ &\left(\frac{Ey_{(i, j+1/2, k+1)}^n - Ey_{(i, j+1/2, k)}^n}{\Delta z^{(k)}} - \frac{Ez_{(i, j+1, k+1/2)}^n - Ez_{(i, j, k+1/2)}^n}{\Delta y^{(j)}} \right) \end{aligned}$$

(2) 分極電流の更新

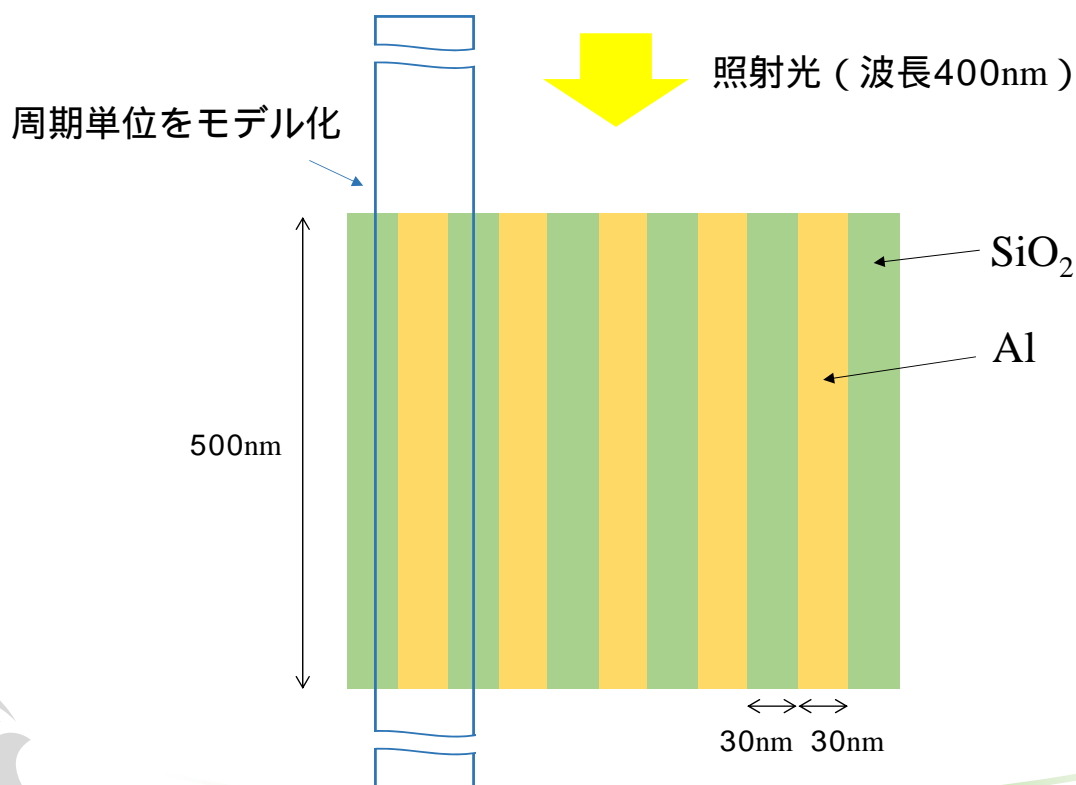
$$\begin{aligned} Jx_{(i+1/2, j+1/2, k+1/2)}^{n+1/2} &= \frac{2 - \Gamma \Delta t}{2 + \Gamma \Delta t} Jx_{(i+1/2, j+1/2, k+1/2)}^{n-1/2} \\ &+ \frac{2 \Delta t}{2 + \Gamma \Delta t} \cdot \varepsilon_0 \omega_p^2 \left(Ex_{(i+1/2, j, k)}^n + Ex_{(i+1/2, j+1, k)}^n + Ex_{(i+1/2, j, k+1)}^n + Ex_{(i+1/2, j+1, k+1)}^n \right) \end{aligned}$$

(3) 電界の更新

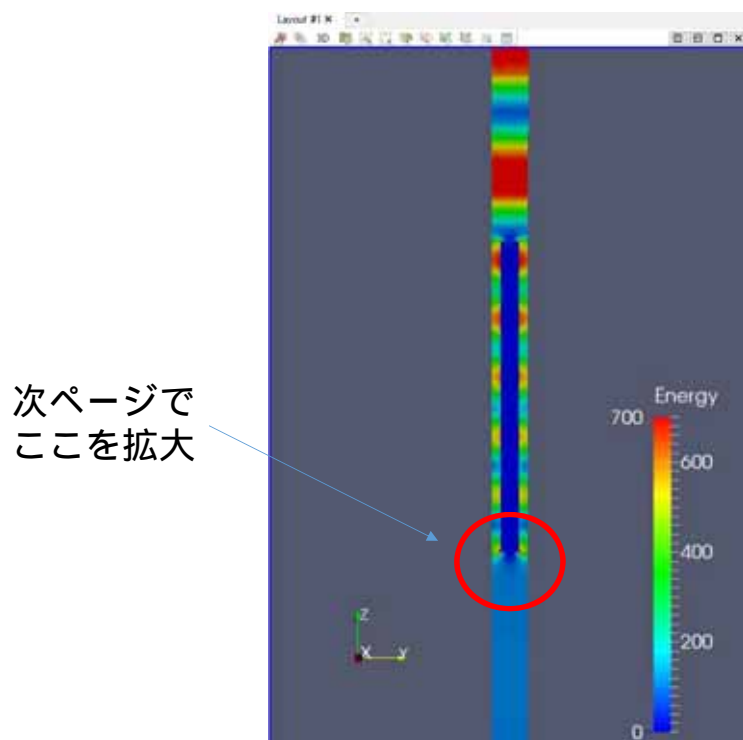
$$\begin{aligned} Ex_{(i+1/2, j, k)}^{n+1} &= Ex_{(i+1/2, j, k)}^n \\ &+ \frac{\Delta t}{\varepsilon_{(i, j, k)}} \cdot \left(\frac{Hz_{(i+1/2, j+1/2, k)}^{n+1/2} - Hz_{(i+1/2, j-1/2, k)}^{n+1/2}}{\Delta y^{(j)}} - \frac{Hy_{(i+1/2, j, k+1/2)}^{n+1/2} - Hy_{(i+1/2, j, k-1/2)}^{n+1/2}}{\Delta z^{(k)}} \right) \\ &- \frac{1}{4} \frac{\Delta t}{\varepsilon_{(i, j, k)}} \cdot \left(Jx_{(i+1/2, j+1/2, k+1/2)}^{n+1/2} + Jx_{(i+1/2, j-1/2, k+1/2)}^{n+1/2} + Jx_{(i+1/2, j+1/2, k-1/2)}^{n+1/2} + Jx_{(i+1/2, j-1/2, k-1/2)}^{n+1/2} \right) \end{aligned}$$



計算事例：回折格子

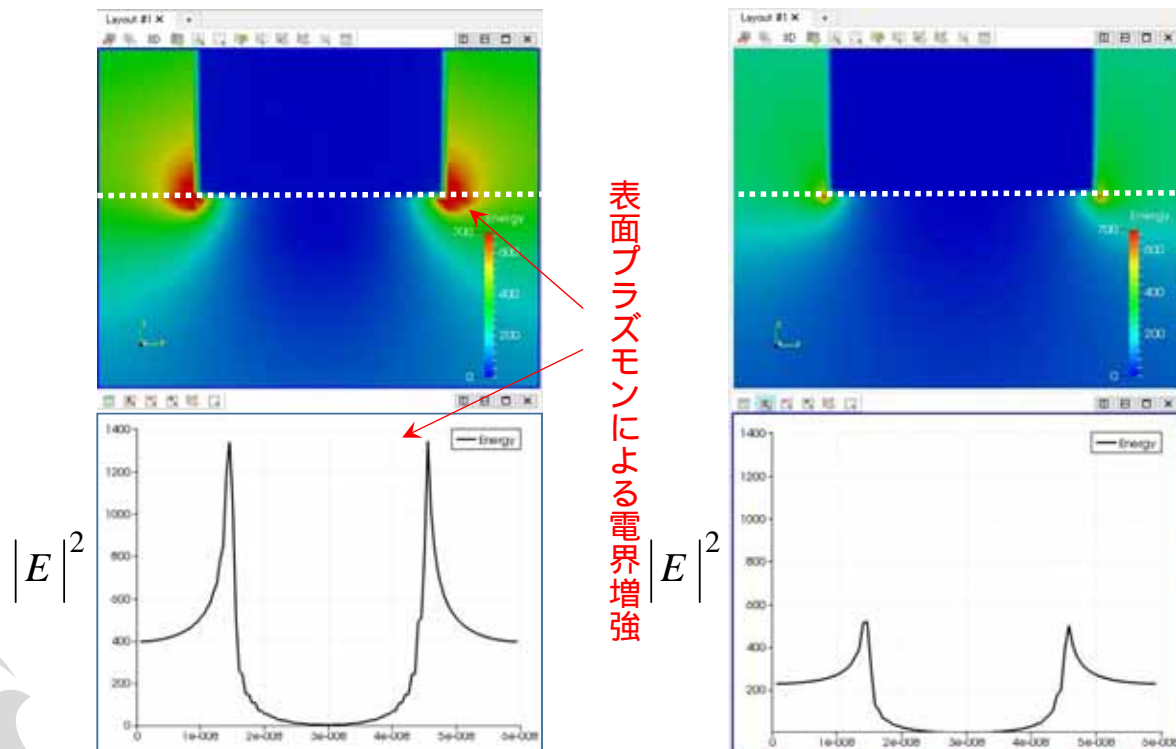


計算事例：回折格子

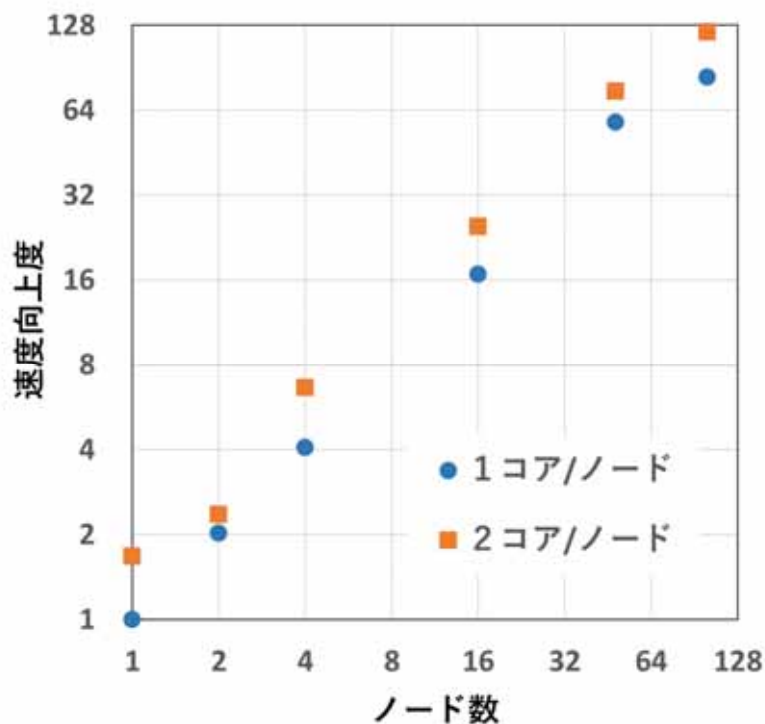


AI：ドローデモデル $\epsilon = -23.38 + j4.763$

AI：無分散の金属モデル



並列計算性能



計算モデル

差分格子数：1000 × 1000 × 1000

計算機環境

CPU：Xeon D-1541-2.1GHz

NW：シャーシ間 40Gbs

シャーシ内ノード間 10Gbs×2
(34ノード/シャーシ)

ご協力 計算科学振興財団 様



AdvanceSoft



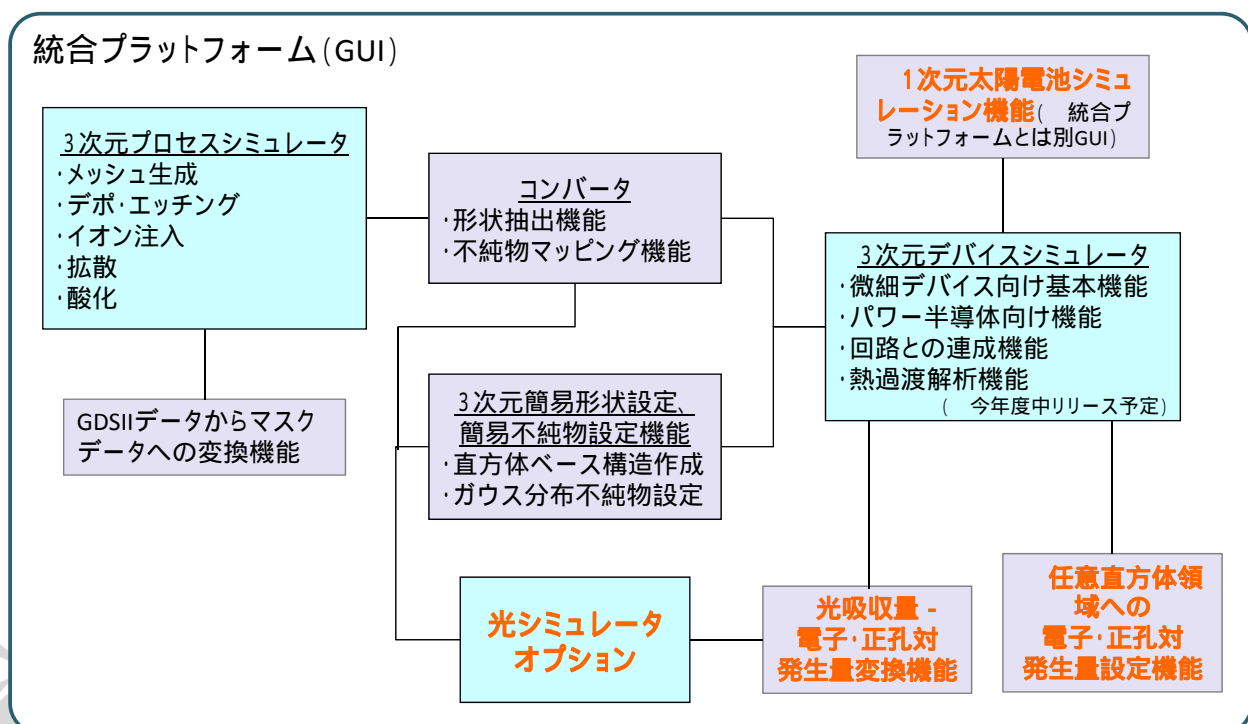
Copyright © 2017 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

LSI デバイス設計CAD システム Advance/TCAD の機能詳細

第1事業部 原田 昌紀

光と半導体の連成解析システムご紹介セミナー
2017年9月21日(木)
アドバンスソフト株式会社

Advance/TCADのシステム構成と 光との連成に関する機能



内容

- プロセスシミュレータ機能詳細
- デバイスシミュレータ機能詳細
- 開発状況と今後の開発予定

プロセスシミュレータの形状処理機能

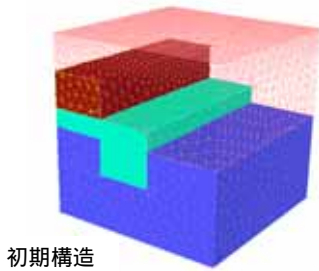
以下の幾何学モデルをベースに各プロセス工程に対応可能。

- 等方性デポジション ➤ 異方性エッチング
- 平坦化デポジション ➤ 等方性エッチング
- 平坦化エッチング
- 指定材質の除去

形状処理モデルとプロセス工程の対応関係

	プロセス工程	幾何学モデル
デポジション	エピタキシャル成長	平坦化デポジション、(等方性デポジション)
	PVD、CVD	等方性デポジション、平坦化デポジション
エッチング	プラズマエッチング	異方性エッチング、等方性エッチング
	反応性イオンエッチング(RIE)	異方性エッチング、(等方性エッチング)
	溶液エッチング	等方性エッチング
	化学的機械的研磨(CMP)	平坦化エッチング

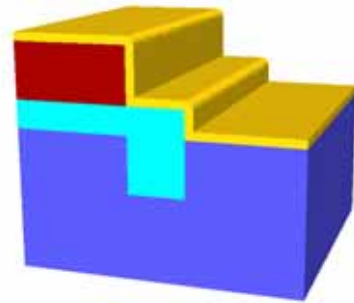
プロセスシミュレータの形状処理機能



等方性デポジション

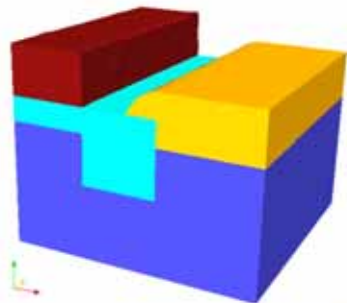
基本機能: 表面に等方的に材質を堆積させる

- どの材質でも同一の処理が行われる
- 縦横比の調節が可能



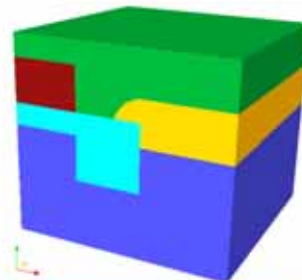
特定材質への等方性デポジション

エピタキシャル成長機能:
特定材質の表面に等方的に材料を堆積させる

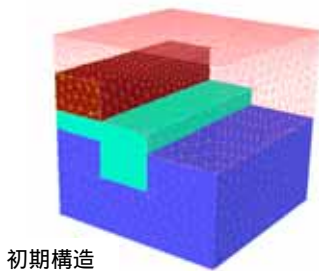


平坦化デポジション

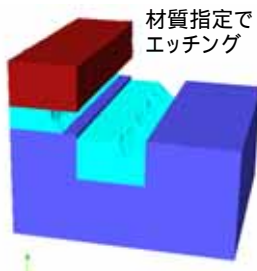
ある高さまで平坦に積み上げる



プロセスシミュレータの形状処理機能



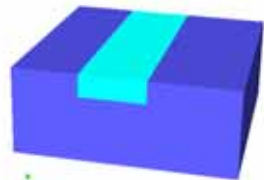
等方性エッチング



材質指定でエッチング
表面に露出している材質を等方的に削り取る。材質指定によって、ある特定の材質のみを削り取る事が可能。

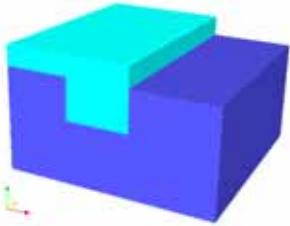
平坦化エッチング

CMP (化学機械研磨) のシミュレート



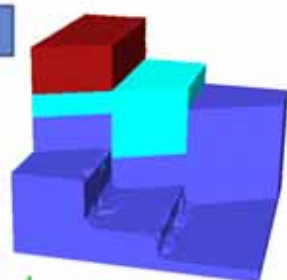
指定材質の除去

特定の材質を取り除く



異方性エッチング

表面に露出しているある特定の材質を異方的に削り取る
マスクパターンに応じて理想的なリソグラフィ結果を計算

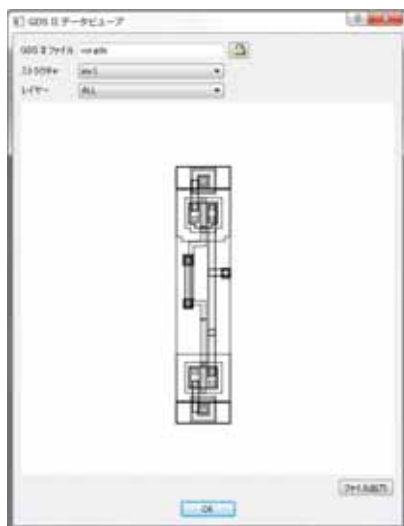


マスクパターンを使用したエッチング例

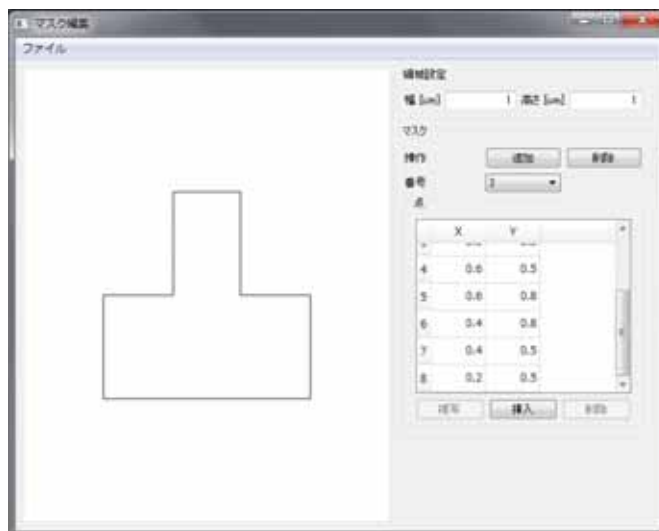
マスクパターンの作成機能 (統合プラットフォーム機能)

統合プラットフォームの以下の機能によりマスクパターンの作成が可能。

GDSIIデータの読み込みおよび
マスクパターンへの変換機能



マスクパターンの編集機能

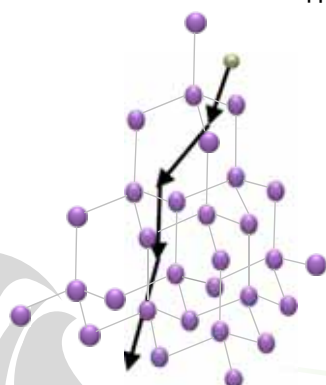


プロセスシミュレータのイオン注入機能

理論枠組み

モンテカルロ法

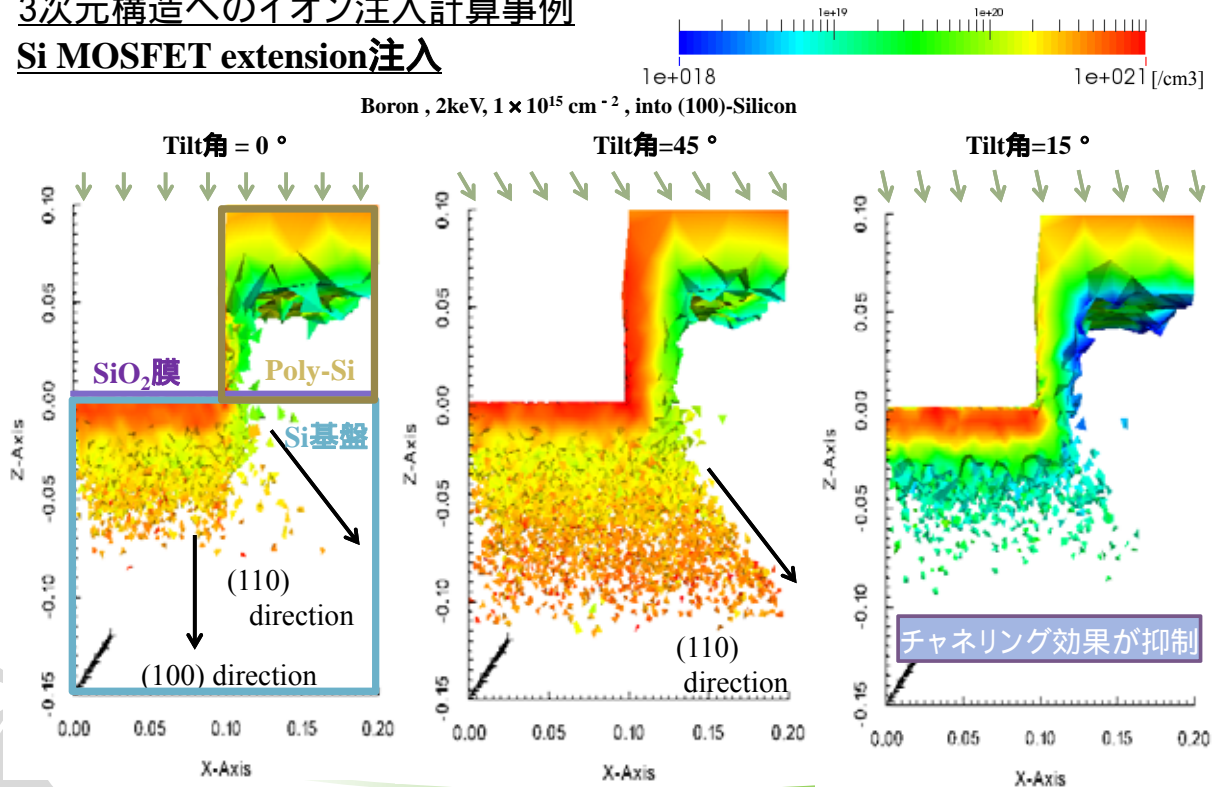
- 注入イオンと材質構成原子との散乱を直接取り扱う
- 3次元の多様な構造に対しシミュレーション可能
- 対応固体材料
 - ◆ アモルファス材質 : 平均自由行程モデル
 - ◆ 結晶材質 : 周期的に並べた単位胞内で衝突原子を探索
 - 結晶破壊モデル : Kinchin-Peace モデル
 - 熱振動モデル : Debyeモデルによる熱振動振幅
- 2体衝突近似
 - 原子間相互作用 : ZBL ポテンシャル
 - 原子・電子間相互作用 : LSS, Firsov モデル ← アモルファス材質
 - VIENNA モデル ← 結晶材質



・結晶構造を正確に反映した2体散乱を取り扱う
 ・対応可能結晶系: **立方晶(Si, 3C-SiC),**
六方晶(4H-SiC, 6H-SiC, GaN)

プロセスシミュレータのイオン注入機能

3次元構造へのイオン注入計算事例 Si MOSFET extension注入

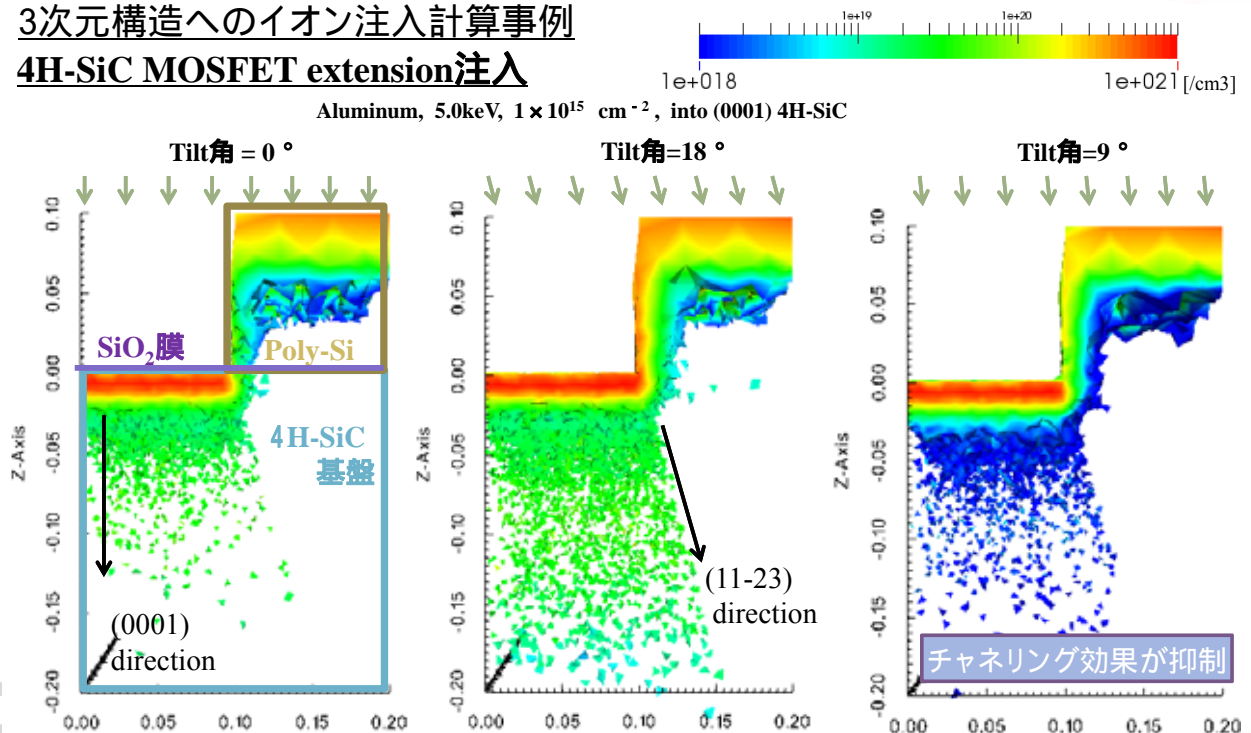


Copyright 2017 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

9

プロセスシミュレータのイオン注入機能

3次元構造へのイオン注入計算事例 4H-SiC MOSFET extension注入



(100)・(0001)軸以外に、(110)・(11-23)軸にも捕捉され、横方向(x軸)に広がる

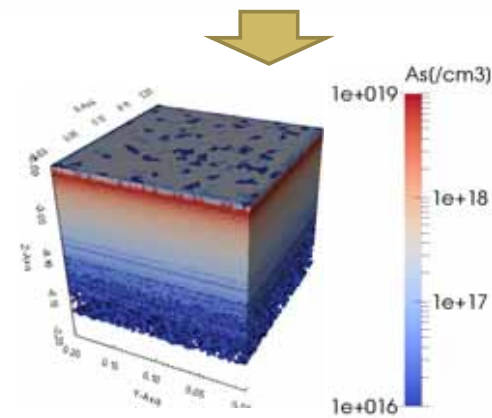
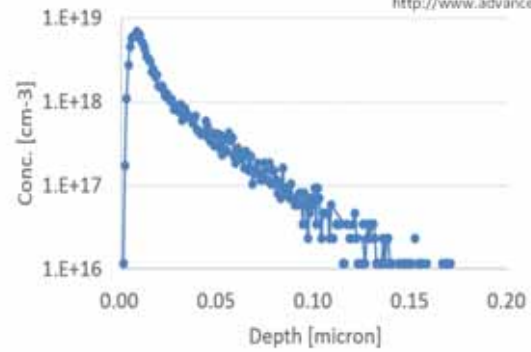
Copyright 2017 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

10

プロセスシミュレータのイオン注入機能

簡易不純物設定機能

- 実験もしくは3次元イオン注入シミュレーションにより得られた1次元不純物分布データをプロセスシミュレーションのメッシュデータにマッピングする。
- マスクファイルにより領域を指定する。メッシュにマッピングする際に、横方向(深さ方向に垂直な方向)には畳み込み積分法を採用。



プロセスシミュレータの拡散解析機能

要素中心コントロールボリューム法を利用

ニュートン法による非線形解析

行列ソルバは汎用ライブラリLISを利用

拡散モデルは非平衡反応拡散モデル及び平衡拡散モデル(フェルミモデル)

- 点欠陥、不純物反応
- 点欠陥クラスタ反応
- 不純物不活性化反応



パラメータ記述で
多様なモデルに対応可能

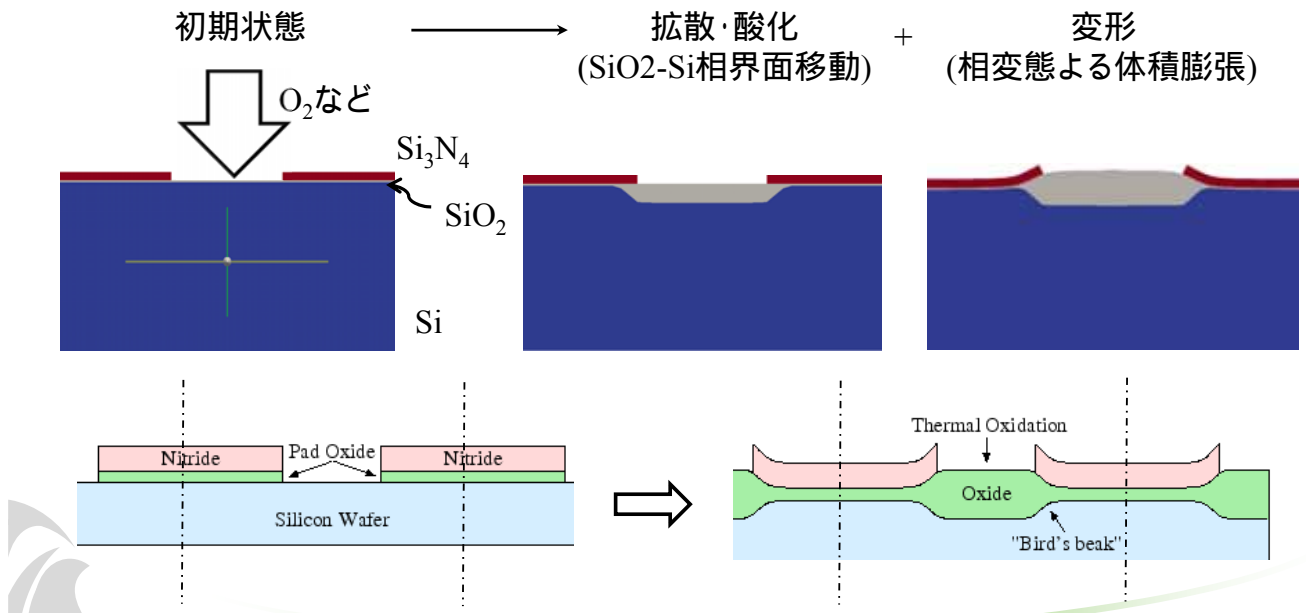
以下についてのパラメータはキャリブレーション済です。

- As/B/Pの非平衡拡散(長時間アニール時の平衡含む拡散)
- As/B/P/Sbの平衡拡散(Fairの論文suprem4準拠)

プロセスシミュレータの酸化解析機能

粘弾性モデルによる三次元酸化解析が可能

酸素拡散 → 相界面移動 → 相変態による体積変化 → 変形



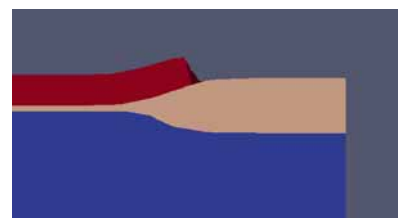
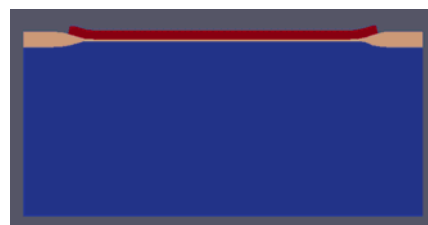
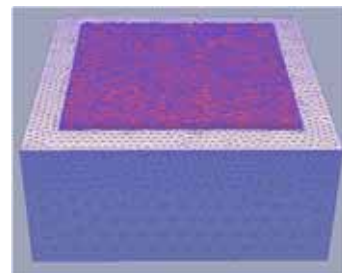
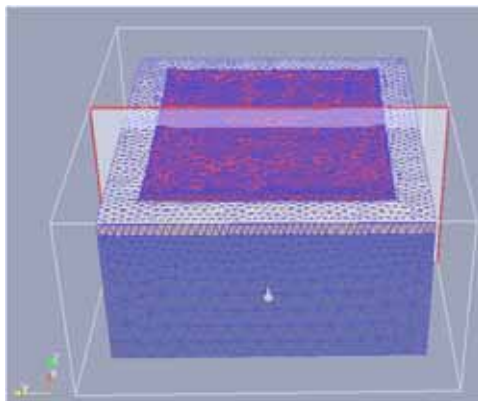
Copyright 2017 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

13

プロセスシミュレータの酸化解析機能

解析事例 1

基板: $4.5\mu\text{m} \times 4.5\mu\text{m} \times 2.0\mu\text{m}$
 SiO₂膜厚: $0.02\mu\text{m}$
 窒化膜厚: $0.1\mu\text{m}$
 マスク: X($0.5\mu\text{m} \sim 4.0\mu\text{m}$)
 Y($0.5\mu\text{m} \sim 4.0\mu\text{m}$)
 酸化時間: Dry430分
 酸化温度: 1000

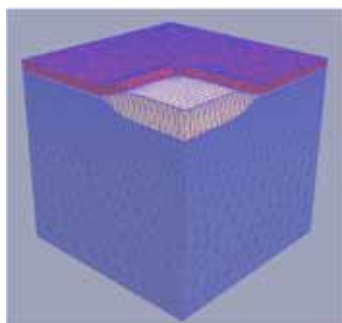
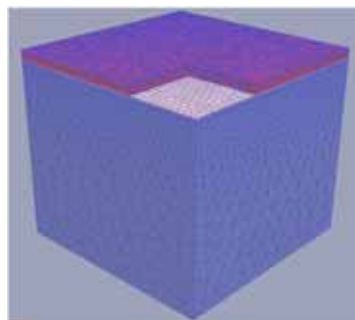


Copyright 2017 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

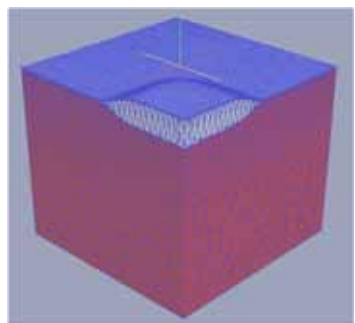
14

解析事例2

基板: $2.25\mu\text{m} \times 2.25\mu\text{m} \times 2.0\mu\text{m}$
SiO₂膜厚: $0.02\mu\text{m}$
窒化膜厚: $0.1\mu\text{m}$
マスク: X($1.5\mu\text{m} \sim 2.25\mu\text{m}$)
 Y($1.1\mu\text{m} \sim 2.25\mu\text{m}$)
酸化時間: Dry960分
酸化温度 1000



6時間後SiO₂厚さ352nm
(z_max=214nm, z_min=-138nm)



16時間後ボロン濃度分布
(酸化されて体積が増えた分だけ薄まっている)

内容

- プロセスシミュレータ機能詳細
- デバイスシミュレータ機能詳細
- 開発状況と今後の開発予定

デバイスシミュレータ：高速3次元解析

Advance/TCADデバイスシミュレータは2次元解析の拡張としてではなく、**3次元解析を前提**として開発されています。

- 任意形状の3次元モデル作成機能(統合プラットフォームの機能として)。
- 独自の高速・安定収束化技術を開発。
- 自社開発による実装レベルでの高速化。



デバイスシミュレータ：高速3次元解析

任意形状の3次元モデル作成機能

- 簡易形状作成や**メッシュ粗密制御**。
- 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。

独自の高速・安定収束化技術を開発

- 高速高電圧解析のための**バイアス粗密調整機能**。
- 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**。

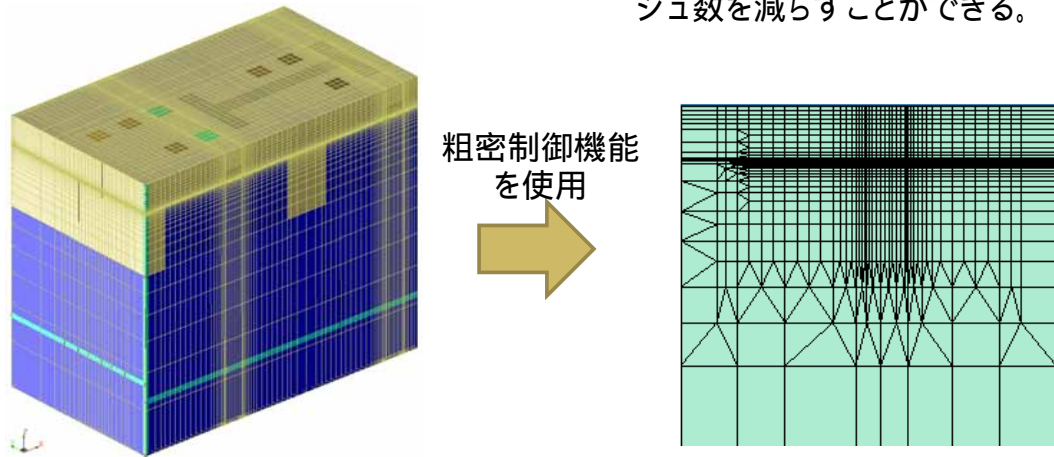


デバイスシミュレータ：高速3次元解析

3次元メッシュ粗密制御機能

基本は六面体メッシュ

精度の必要のない領域のメッシュ数を減らすことができる。



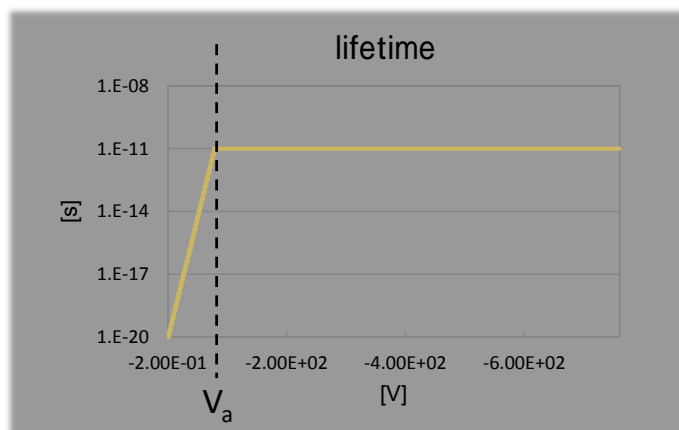
粗密制御がし易く、スケールが大きくことなる領域が混在したモデルにも対応。

デバイスシミュレータ：高速3次元解析

～ 仮想ライフタイム法 (独自の高速・安定収束化技術) ～

計算初期における、電圧昇圧時の計算収束性を向上させるため、設定電圧に至るまでの電圧に応じて電子と正孔のライフタイムを変化させます。

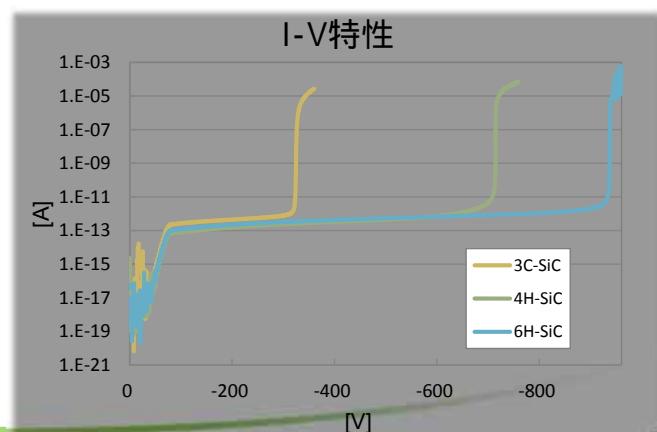
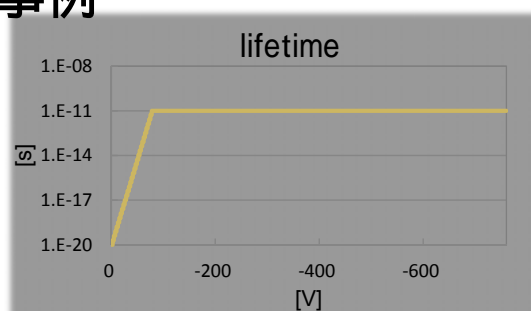
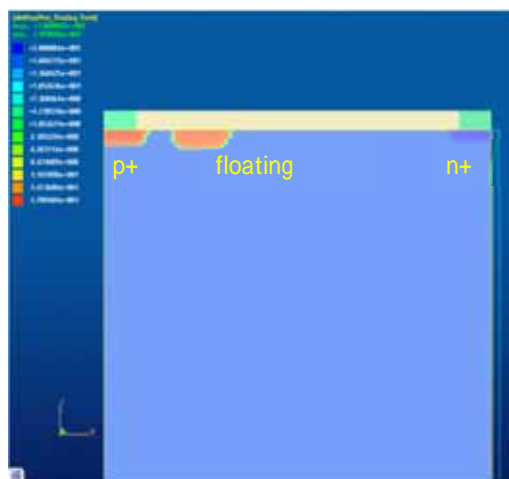
$$\tau(V) = \alpha(V) \tau_{\text{設定値}} \quad \begin{array}{l} \alpha \leq 1 \quad (V \leq V_a) \\ \alpha = 1 \quad (V \geq V_a) \end{array}$$



デバイスシミュレータ：高速3次元解析

～ 仮想ライフタイム法適用事例 ～

適用事例: SiCダイオード耐圧計算



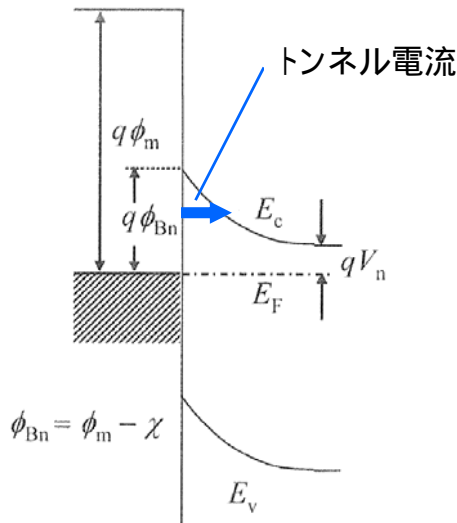
デバイスシミュレータ：幅広いデバイスに対応

超微細デバイス、パワーデバイスのそれぞれに特有な解析機能を備えています。

- シリコン、ワイドギャップ半導体 (GaAs系、SiC系、GaN系) の物性値を装備。
- 物性値の手動変更により新材料探索も可能。
- 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。
- 界面における連続準位を複数種設定可能 (マルチ指数関数モデル)。
- GaN系およびSiC系デバイスでみられる深い準位のイオン化率の変化を一準位再結合モデルにより解析可能。

デバイスシミュレータ：幅広いデバイスに対応

～ショットキー接合トンネル電流モデル～



Fowler-Nordheimモデル

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

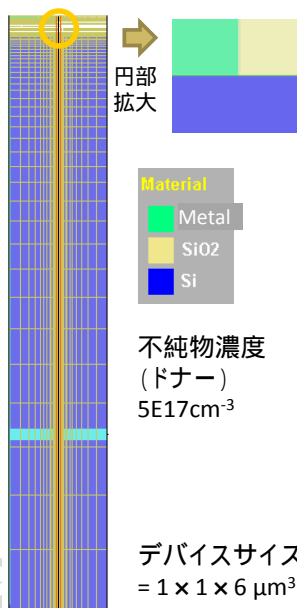
$$B = \frac{4\sqrt{2m}}{3q\hbar} (q\phi_B - q\kappa)^{3/2}$$

A、n、m、κは入力パラメータとする。
κはband loweringを表す。

デバイスシミュレータ：幅広いデバイスに対応

～ショットキー接合トンネル電流モデル～

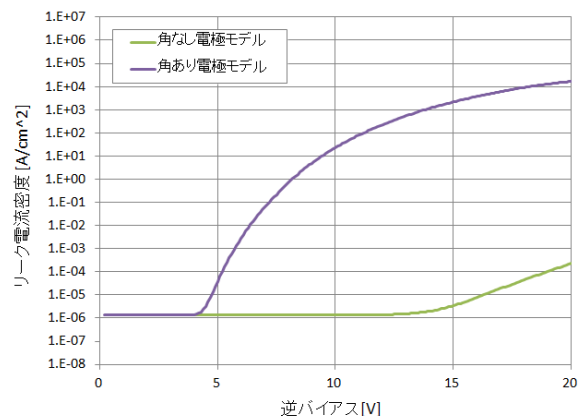
ショットキーダイオード
角あり電極モデル



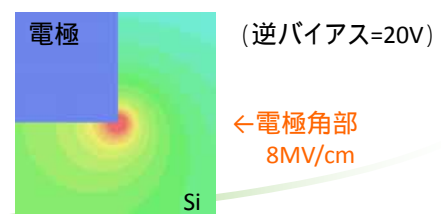
FNモデルパラメータ

$\phi_B = 0.8\text{eV}$
 $A = 1 \times 10^{-4} [\text{A}/\text{V}^2]$
 $n = 2$
 $m = 1 \times m0$
 $\kappa = 0.2 [\text{eV}]$

逆バイアス電流特性



電極角部電界強度分布



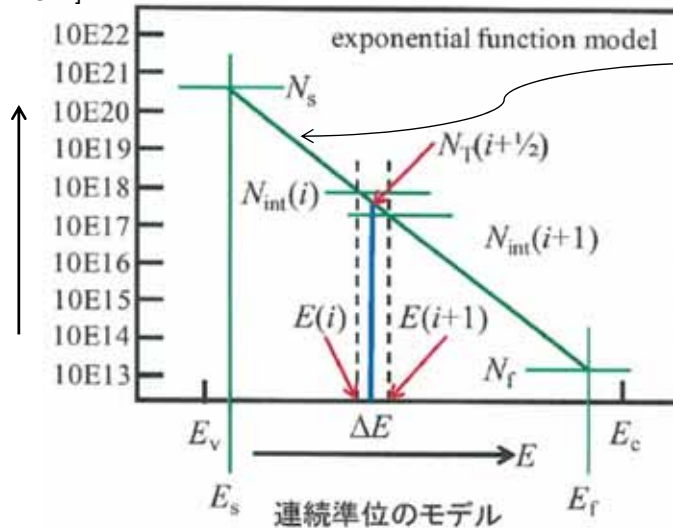
デバイスシミュレータ：幅広いデバイスに対応

～ 界面の連続準位の計算機能 ～

機能概要

連続準位密度
[cm⁻²eV⁻¹]

アクセプター型の場合の例



$$N_{\text{int}}(E) = A \times \exp[-\alpha E]$$

で表される連続準位
を最大10種類まで
設定可能。

デバイスシミュレータ：幅広いデバイスに対応

～ 深い準位、界面準位の不完全イオン化計算機能 ～

準位の電子占有率 f の式 (レート方程式)

$$\frac{df}{dt} = v_e \sigma_e [n(1-f) - n_1 f] - v_p \sigma_p [pf - (1-f)p_1]$$

$v_{n,p}$: 電子, 正孔の熱速度

$\sigma_{n,p}$: 電子, 正孔の捕獲断面積

再結合項 R の計算

$$R = -\frac{dn}{dt} = v_e \sigma_e n N_t (1-f_t) - v_e \sigma_e N_t f_t N_c \exp(-\varepsilon_t / k_B T)$$

$$R = -\frac{dp}{dt} = v_p \sigma_p p N_t f_t - v_p \sigma_p N_t (1-f_t) N_v \exp[-(E_g - \varepsilon_t) / k_B T]$$

空間電荷の計算

ドナー型: $N_t(1-f_t)$

アクセプター型: $-N_t f_t$

N_t : 準位の濃度

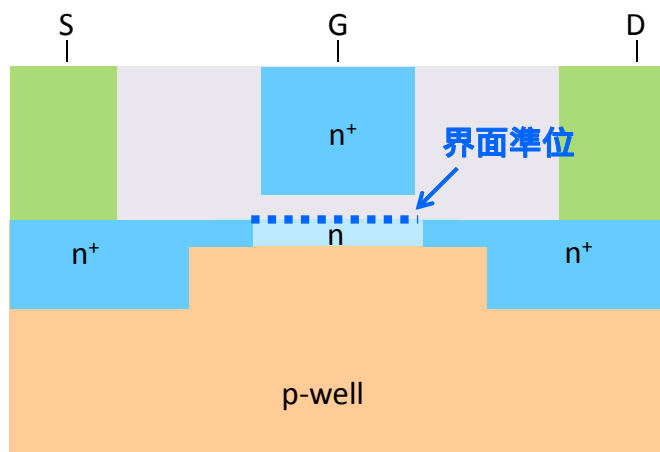
N_c : 伝導帯の状態密度

N_v : 価電子帯の状態密度

デバイスシミュレータ：幅広いデバイスに対応

～ 界面準位不完全イオン化計算機能 ～

解析事例：NMOSFET界面準位によるドレイン電流過渡応答への影響



バイアス印加方法

$V_d = 3V$ 、 $V_g = 0V$
で定常計算。

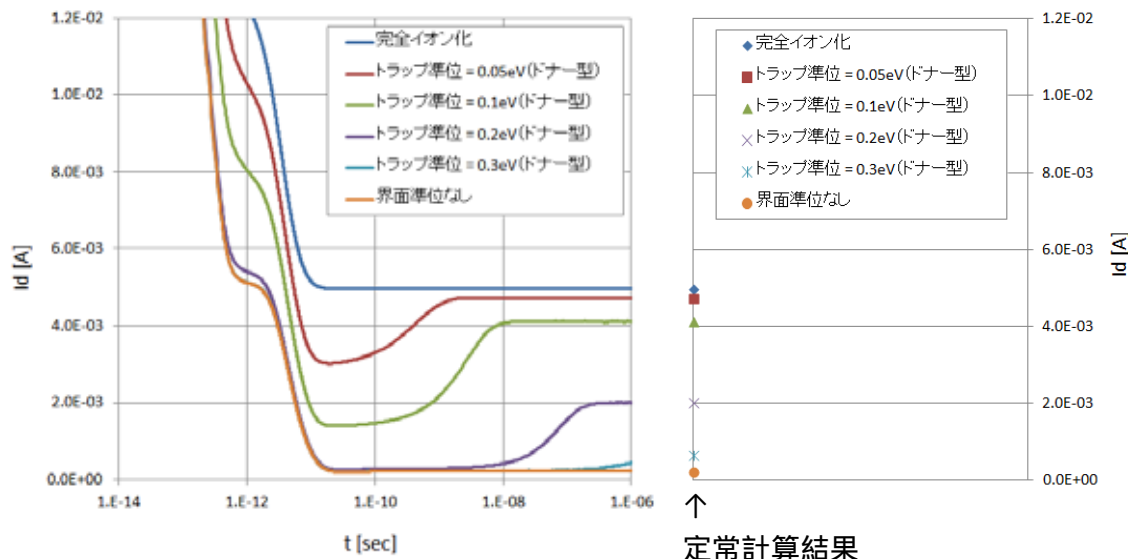
$t = 0 \text{ sec}$ でステップ
状に $V_g = -3V$ を印
加し過渡解析。

デプレッション型NMOSFET

デバイスシミュレータ：幅広いデバイスに対応

～ 界面準位不完全イオン化計算機能 ～

解析事例：NMOSFET界面準位によるドレイン電流時間変化への影響



デバイスシミュレータ：ロバストな計算手法

デバイスシミュレーションに特有な計算収束性などの課題に対応しています。

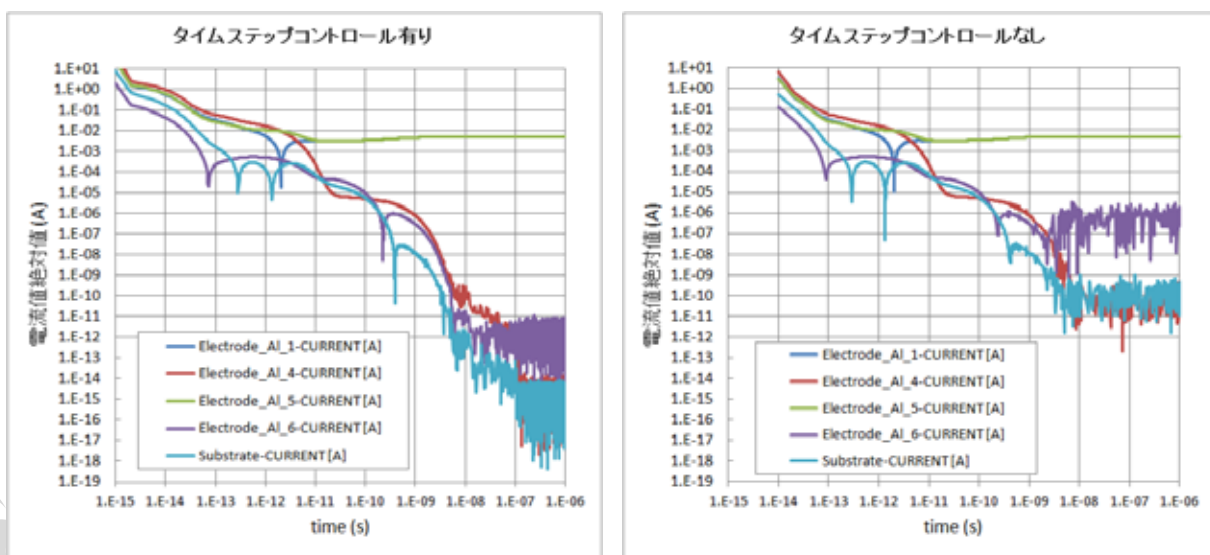
- **ガンメル法とカップル法の両計算手法**を搭載しています。
- 過渡解析では**時間刻み幅自動制御**、**任意入力波形**の設定が可能。
- **バリスティック伝導**に対する高精度・高速解析手法を搭載。
- ワイドギャップ半導体における超低電流解析には**二準位間遷移再結合モデル**により超低電流での収束が可能です。

デバイスシミュレータ：ロバストな計算手法

～ 過渡解析における時間刻みの自動調整機能 ～

検証計算：界面準位モデル(donor型、0.05eV)非定常計算

タイムステップコントロール有り無しでの電流値絶対値の時間変化

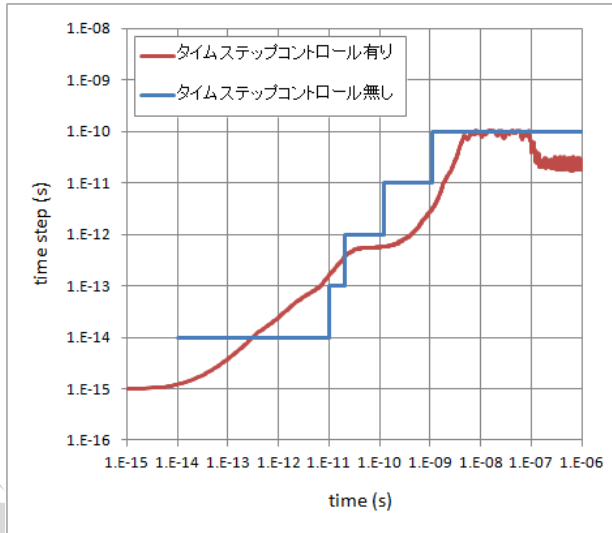


デバイスシミュレータ：ロバストな計算手法

～ 過渡解析における時間刻みの自動調整機能～

検証計算：界面準位モデル (donor型、0.05eV) 非定常計算

タイムステップコントロール有り無しでの
時間刻みの時間変化



タイムステップコントロール有り無しでの
時間ステップ数

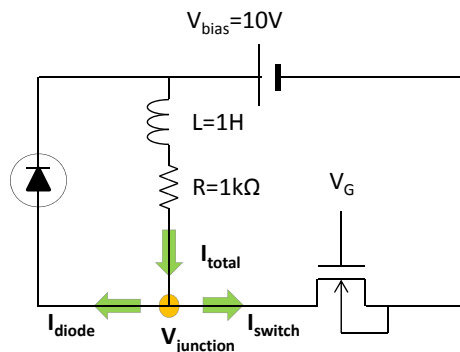
	タイムステップコントロール有り	タイムステップコントロール無し
1E-8までの時間ステップ数	1581	1389
1E-7までの時間ステップ数	2597	2289

デバイスシミュレータ：大規模解析

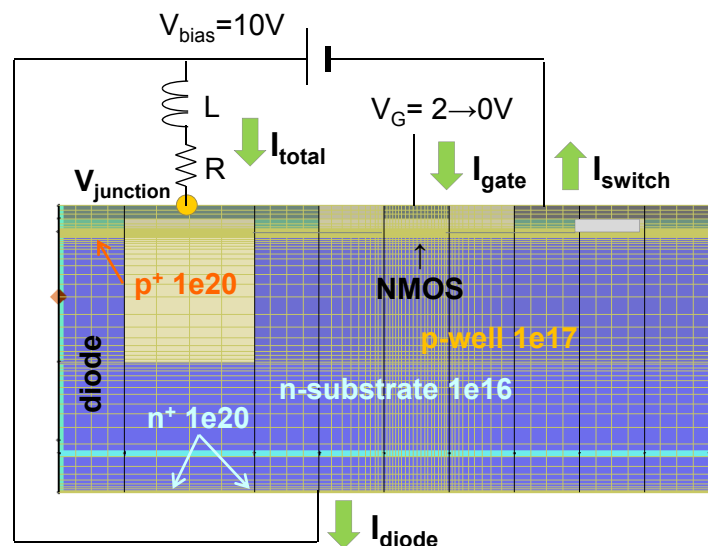
～ 複数デバイスと回路の一括解析～

解析事例 1：モータ制御回路のスイッチオフ時の動作

回路



デバイスシミュレーションモデル



初期状態

スイッチがオンの状態 ($V_G = 2V$)。

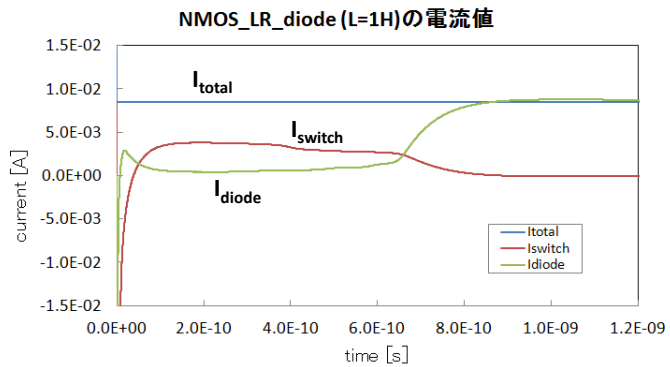
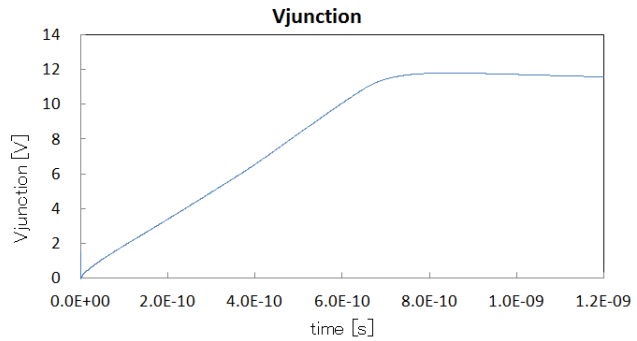
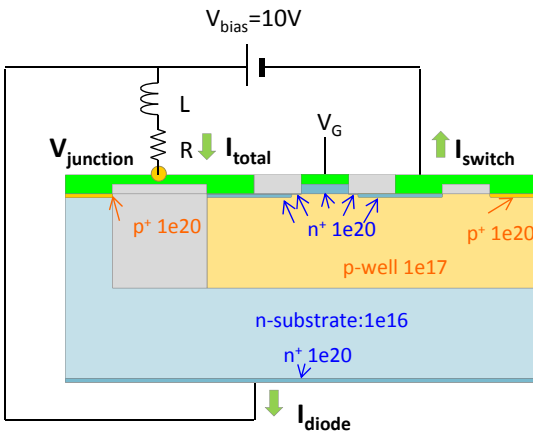
解析内容

スイッチをオフ ($V_G = 0V$) した後の過渡解析

デバイスシミュレータ：大規模解析

～ 複数デバイスと回路の一括解析 ～

解析事例 1：モータ制御回路のスイッチオフ時の動作



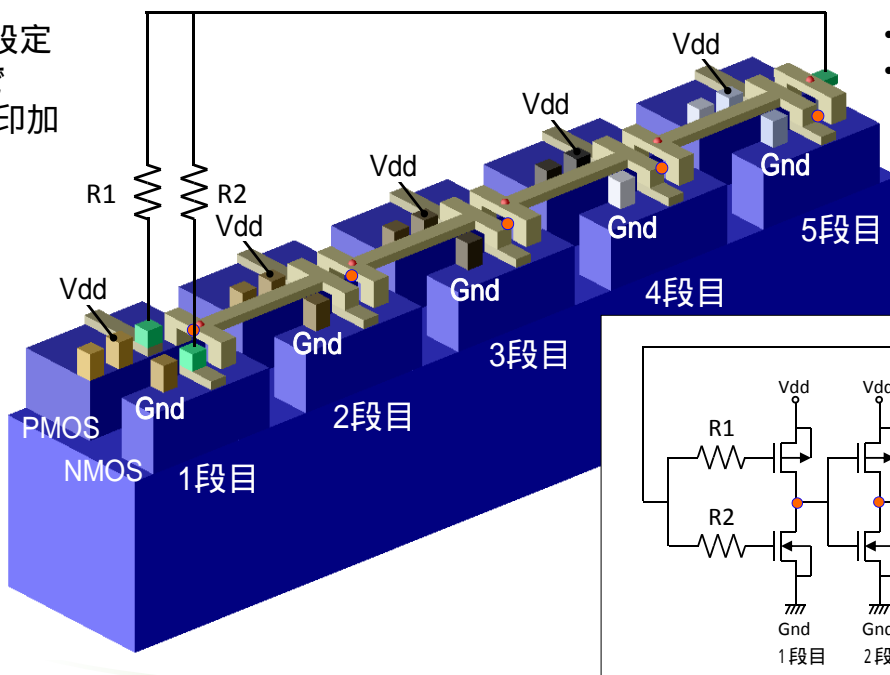
行列計算ベースで一括して計算することで、高速計算可能。行列計算を別々にして連成する場合と比較して当社比で20倍の高速化。

デバイスシミュレータ：大規模解析

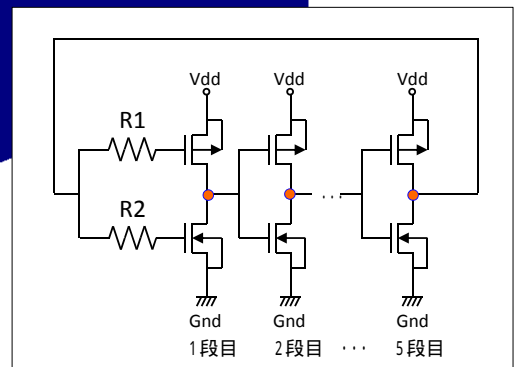
～ 複数デバイスと回路の一括解析 ～

解析事例 2：5 段CMOSリングオシレータ

バイアス設定
時刻t=0で
Vdd = 2 V印加



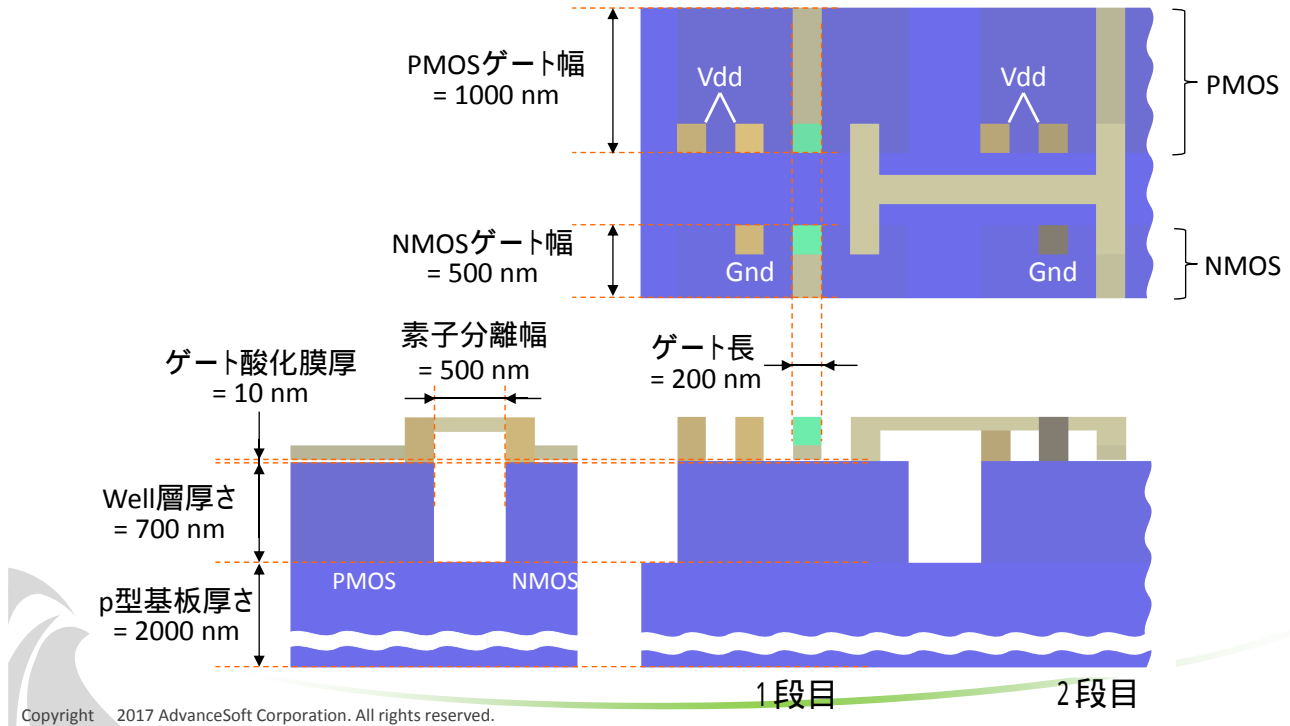
- SiO₂は非表示。
- ● は電位測定点



デバイスシミュレータ：大規模解析

～ 複数デバイスと回路の一括解析 ～

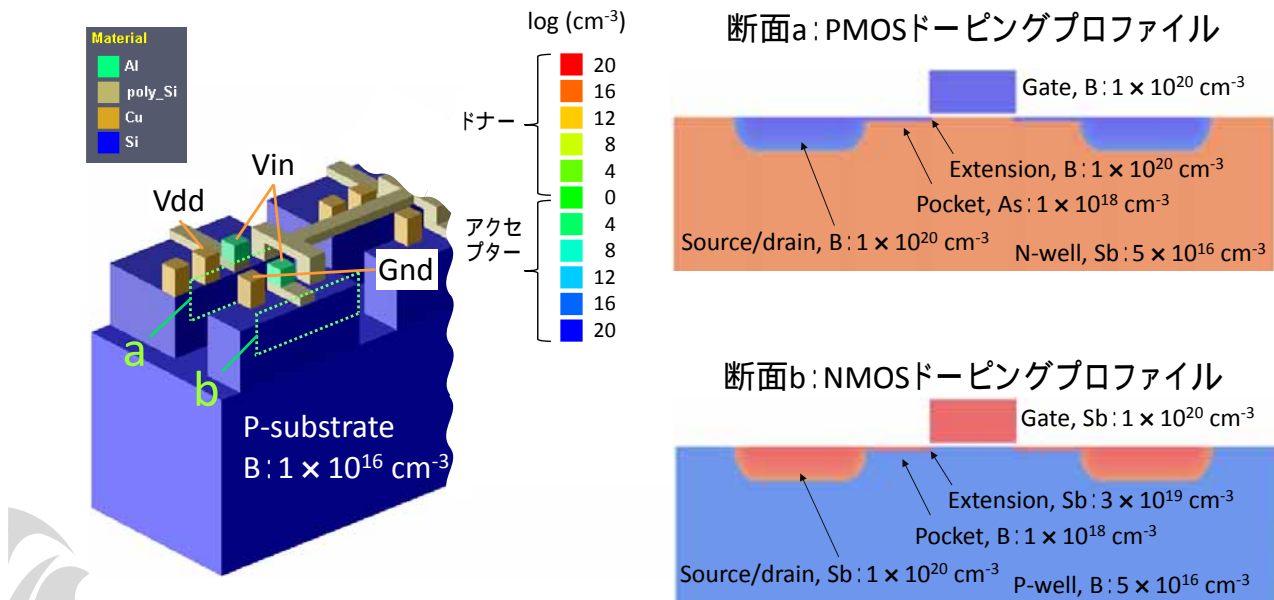
解析事例 2：5 段CMOSリングオシレータ



デバイスシミュレータ：大規模解析

～ 複数デバイスと回路の一括解析 ～

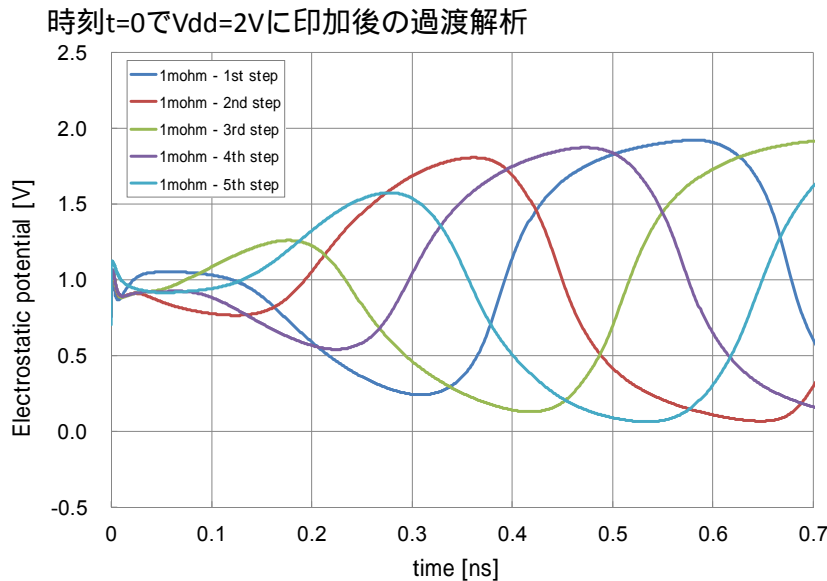
解析事例 2：5 段CMOSリングオシレータ



デバイスシミュレータ：大規模解析

～ 複数デバイスと回路の一括解析 ～

解析事例 2：5 段CMOSリングオシレータ



静電ポテンシャルはゼロバイアス時の値からの相対値

複数段CMOSリングオシレータの一括解析が可能。

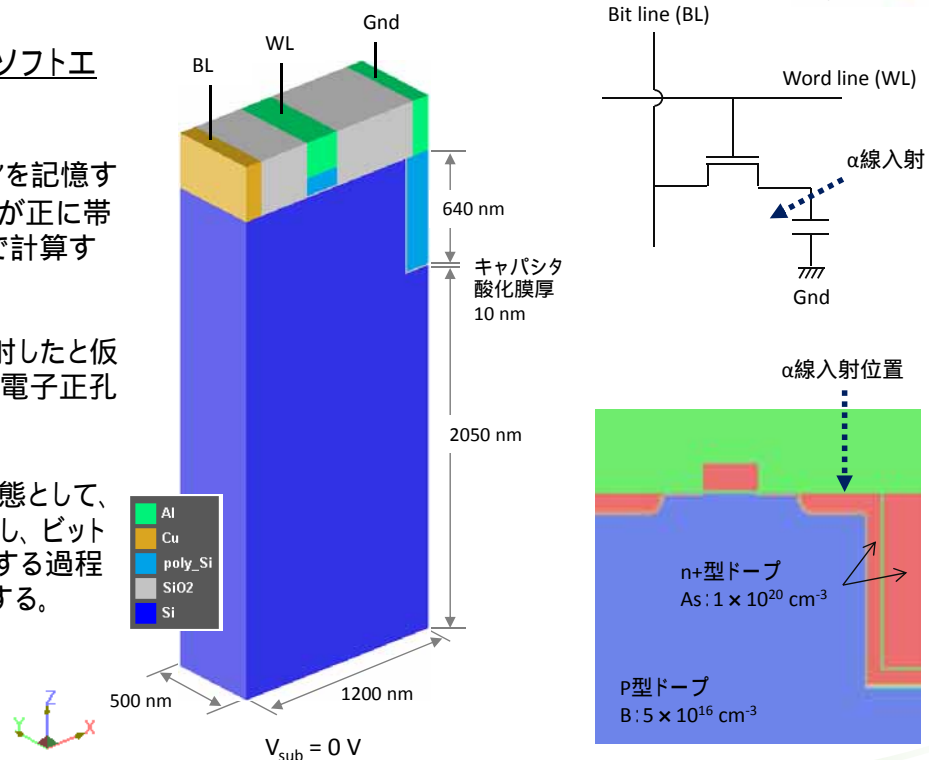
電子・正孔対発生量設定機能：DRAMソフトエラー解析例

α線によるDRAMのソフトエラー解析手順

DRAMのビットに"1"を記憶する過程(キャパシタが正に帯電)を非常計算で計算する。

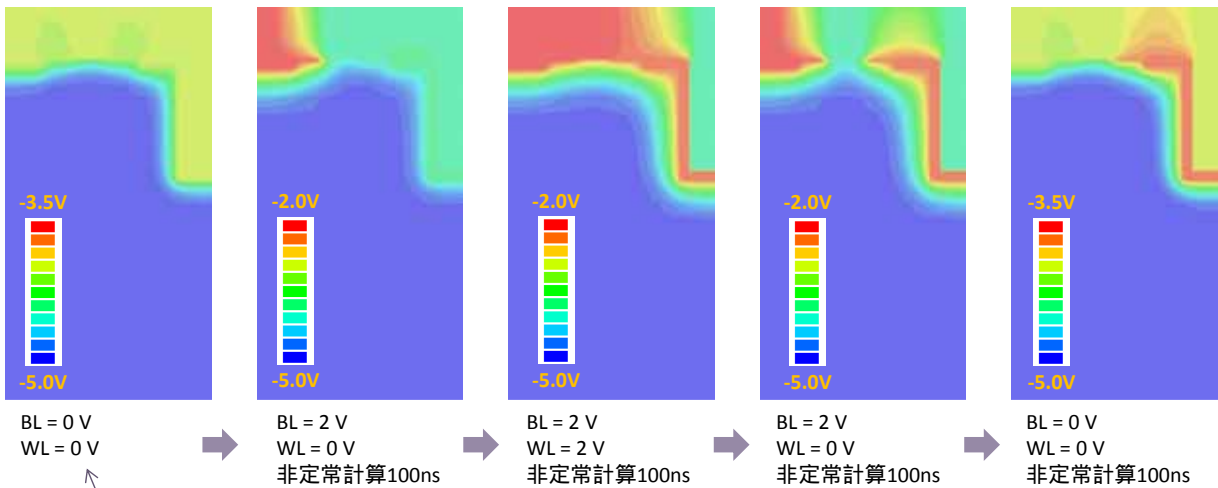
空乏層にα線が入射したと仮定し、α線の軌跡に電子正孔対を分布させる。

の状態を初期状態として、非常計算を実施し、ビットが"1"が"0"に反転する過程をシミュレーションする。

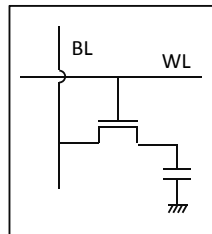


電子・正孔対発生量設定機能：DRAMソフトエラー解析例

ステップ 1 : ビットへの"1"の書き込み時(静電ポテンシャル分布)



キャパシタが中性な
ビット"0"の状態



キャパシタに正の
電荷が蓄積された
ビット"1"の状態

電子・正孔対発生量設定機能：DRAMソフトエラー解析例

ステップ 2 : α 線の軌跡に電子正孔対を分布させる

α 線による電子正孔対発生量の概算

α 線のエネルギー：1~10MeV程度。保護膜を通過して0.1MeV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。

0.1MeVの α 線に対するSiの電子的阻止能： 2.094×10^3 (MeV/cm)

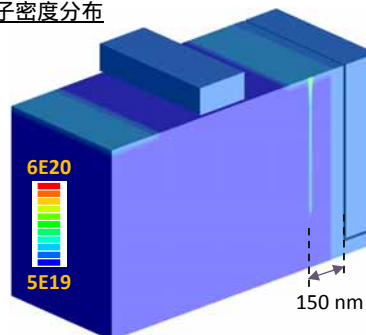
・侵入深さ：0.478 μm
・電子正孔対の発生量を生成エネルギー3.6eVから計算： 0.582×10^9 cm^{-1}

およそ28000個の電子正孔対が発生。

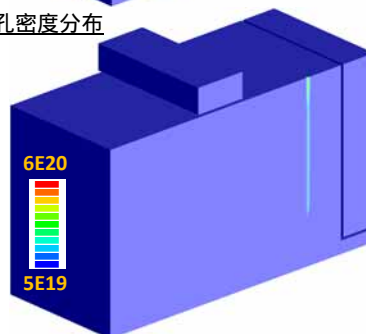
<http://physics.nist.gov/PhysRefData/Star/Text/ASTAR.html>

28000個の電子正孔対を、10nm x 10nm x 478nmの領域に、近似的に均一に分布させる。

電子密度分布



正孔密度分布



入射直後(0.1ps)の
静電ポテンシャル分布



ステップ : α 線入射後0 ~ 100psの非定常計算

0.2 ~ 5psの
静電ポテンシャル分布



6 ~ 50psの
静電ポテンシャル分布



100ps後の
静電ポテンシャル分布



キャパシタは中
性なビット"0"
の状態になる



内容

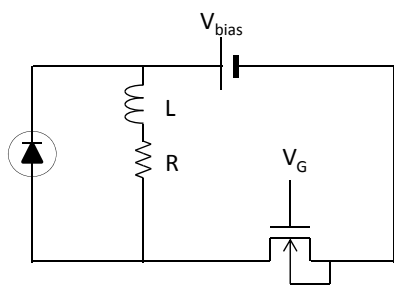
- プロセスシミュレータ機能詳細
- デバイスシミュレータ機能詳細
- 開発状況と今後の開発予定

開発状況と今後の開発予定

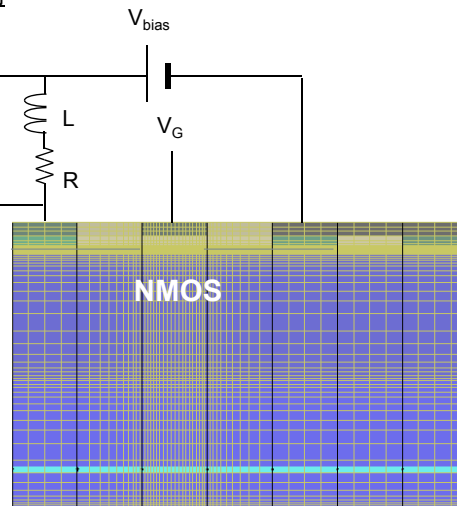
複数デバイスと回路の一括解析機能の拡張

拡張 : 非線形素子の回路モデルも扱えるようにする。

モータ制御回路の解析モデルでの例



非線形素子
回路モデル
(spice3f5のモデル)



開発状況

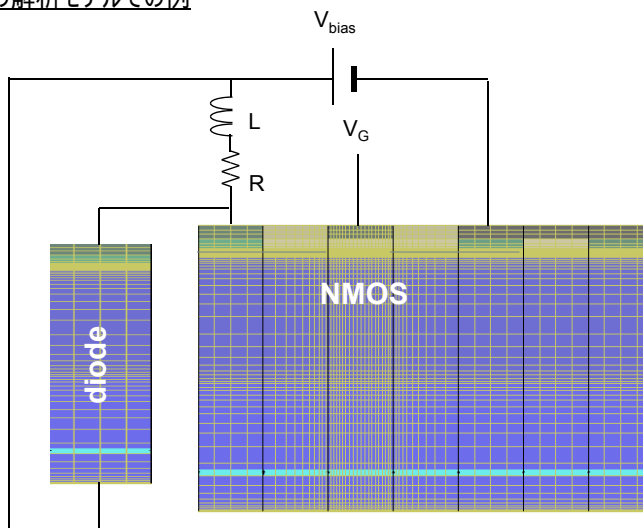
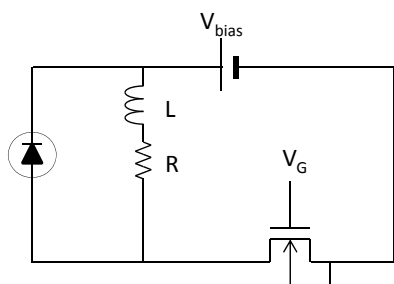
デバイスシミュレータと回路シミュレータspice3f5のモデルを連成する機能の第一バージョンが完成。現在テスト中。

開発状況と今後の開発予定

複数デバイスと回路の一括解析機能の拡張

拡張 : 複数デバイスを個別にモデル化

モータ制御回路の解析モデルでの例



開発状況

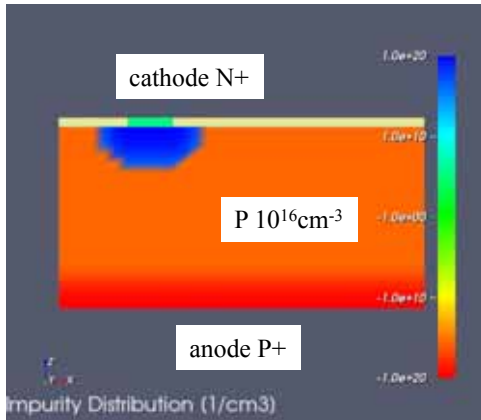
設計開始。
本年度中の第一バージョン完成を目指す。

作成が容易な小規模モデルを組み合わせ
て高速、高精度連成解析が可能

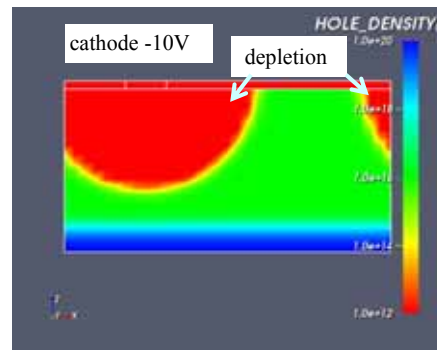
開発状況と今後の開発予定

周期的境界条件機能

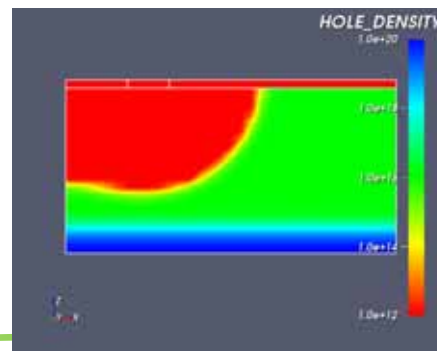
計算事例: pnダイオード逆バイアス印加



周期的境界条件使用



反射境界条件(従来条件)使用



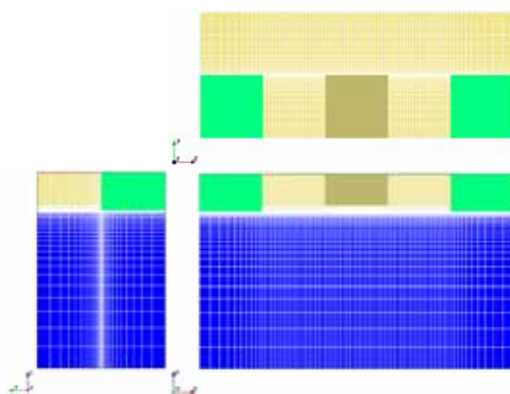
開発状況

プロトタイプ版が完成した。
(プロトタイプ版では他の機能との併用に制限があります)。

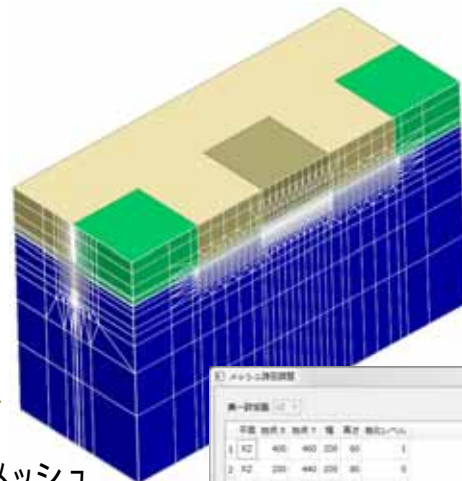
開発状況と今後の開発予定

メッシュ粗密制御機能の拡張

- 従来一面のみが設定可能であったが、二面まで設定可能とする。
- GUIにより領域の位置、サイズ、粗化レベルを微調整可能とする。



二面でのメッシュ粗密制御実行



開発状況

本年度中に完成予定。

開発状況と今後の開発予定

開発状況まとめ

- ▶ 複数デバイスと回路の一括解析機能の拡張 : 非線形素子の回路モデルも扱えるようにする。
第一バージョン完成。テスト中。
- ▶ 複数デバイスと回路の一括解析機能の拡張 : 複数デバイスを個別にモデル化
設計開始。本年度中の第一バージョン完成を目指す。
- ▶ メッシュ生成機能の拡張 : 二面からのメッシュ粗密調整。
本年度中に完成。
- ▶ 熱過渡解析機能。
本年度中にプロトタイプ完成。
- ▶ 拡散シミュレータの並列化
今年度中に作業開始。



ご清聴ありがとうございました。





警告

このレポートに収録されている文章および内容については、ご自身のために役立つ用途に限定して無料配布しています。
このレポートを、販売、オークション、その他の目的で利用するには、著作権者の許諾が必要になります。
このレポートに含まれている内容を、その一部でも著作権者の許諾なしに、複製、改変、配布を行うことおよびインターネット上で提供する等により、一般へ送ることは法律によって固く禁止されています。