半導体プロセス・デバイスシミュレータ Advance/TCADの改良

原田 昌紀* 小瀬村 大亮* 小山田 隆行* 大倉 康幸* 小田 嘉則* 宮脇 綾我*

Improvements to Advance/TCAD, semiconductor process and device simulator

Masanori Harada^{*}, Daisuke Kosemura^{*}, Takayuki Oyamada^{*}, Yasuyuki Ookura^{*}, Yoshinori Oda^{*},

and Ryouga Miyawaki*

世界的な半導体デバイスへの需要増加に対する産業界の半導体分野への投資に対応すべく、当社で自 社開発している半導体のプロセス・デバイスシミュレータである Advance/TCAD について、ソルバーの 機能や使い勝手の改良を行っている。本記事ではその改良の一部を紹介する。

https://doi.org/10.69290/j.001182-vol32

Keywords: 半導体、TCAD、プロセスシミュレーション、デバイスシミュレーション、イオン注入、デポ ジション、エッチング、MPI 並列、メッシュ

1. はじめに

半導体への世界的な需要の増加や世界情勢を 背景に世界中で次世代半導体の開発が加速して いる。国内においても同様であり、最先端の微細 半導体デバイスについては、生産額世界一位の台 湾 TSMC の工場の熊本への誘致や、米 IBM から 技術提供を受けて 2nm デバイスの量産を目指す Rapidus の工場立ち上げなど、国策としても半導 体産業が活性化されている。また、日本の半導体 メーカーが得意とするパワー半導体についても その市場は今後も増加することが予想され、各社 は増産体制の増強や高性能なワイドギャップ半 導体デバイスの開発への投資を進めている。

このような背景の中、当社でも、自社開発して いる半導体のプロセスとデバイスのシミュレー タである Advance/TCAD を半導体の研究・開発現 場にさらに普及させるべく、2023 年度からソルバ ーの機能や使い勝手の改良を加速している。本記 事はその改良の一部を紹介するものである。

次章以降に、プロセスシミュレーションのイオ

*アドバンスソフト株式会社 第1事業部

1st Computational Science and Engineering Group, AdvanceSoft Corporatio ン注入機能における改良、プロセス・デバイスコ ンバータにおける改良、プロセスシミュレーショ ンのメッシュ分割における改良について紹介す る。なお、本記事では紹介しないデバイスシミュ レーションについても移動度モデルの追加など の機能改良を実施している。

2. イオン注入機能の改良

本章ではAdvance/TCAD プロセスシミュレータ のイオン注入機能において実施した改良につい て紹介する。

2.1.1 次元イオン注入機能の開発

2.1.1. はじめに

本節では新たに開発した1次元のイオン注入機 能について説明する。既存プログラムにも簡易的 に1次元的な計算をできる機能はあったが、それ を補完するような機能として新たに開発した内 容であり、今後、簡易一次元計算機能と統合して いく予定である。

ここでは、今回開発した機能の特徴やその実装 において考慮した点を中心に紹介する。なお、既 存の簡易一次元計算機能についてはここでは述 べない。

2.1.2. 注入イオンの初期位置指定

1次元イオン注入の初期位置を指定できるよう にした。また、初期位置をランダムに設定するオ プションもあわせて導入した。このような1点か らのイオン注入は簡単であるが、初期位置依存性 が現れる可能性がある。例えば、初期位置が偶然 表面原子の直上にあると、注入イオンはほとんど すべて表面で反射され、基板へ入り込まない(も し原子の熱振動がゼロであれば、すべてのイオン が反射される)。あるいは、初期位置が表面原子の 間に置かれると、チルト角度や基板傾斜がない場 合はチャネリングにより深い位置まで侵入する ことになる。ランダムな初期位置を設定すること は、これらの意図しない初期位置依存性を排除す ることができる。この場合、乱数を設定するだけ なので、計算コストの増加もほとんどない。

一例として, Si(001)に対して As を注入する場 合の不純物濃度の深さ依存性を図1と図2に示す。 図1に示すようにイオンの初期位置をランダムに 設定した場合と固定した場合とでは、深さ 0.1-0.2um 付近のテイルの形状が異なっていることが 分かる。図2から判るようにランダムに初期位置 を設定する方が3次元計算結果により近いことが 分かる。



図 1 ランダム初期位置を導入した場合と初期 位置を固定した場合の不純物分布の違い (Si(001)への As 注入の例)



図 2 ランダム初期位置を導入した場合の3次 元イオン注入計算との不純物分布の違い (Si(001)へのAs注入の例)

2.1.3.1次元結晶破壊モデル

注入イオンは結晶原子と2体散乱を行うが,こ の際に注入イオンから結晶原子に移行するエネ ルギーは結晶破壊エネルギーとして「標的原子が 含まれるプロセスメッシュの要素」に蓄積される。 1次元モデルでは,z座標のみを考慮した「1次元 プロセスメッシュの要素」に蓄積していく。「1次 元プロセスメッシュ」の選択方法に工夫が必要で ある。

1次元イオン注入機能では境界条件がなく注入 イオンはデバイス解析領域の範囲に関係なく進 行する。3次元イオン注入機能では、基板の結晶 格子との2体衝突によりイオンが失うエネルギー (=結晶破壊エネルギー)はその位置での3次元 メッシュの要素に蓄積されるが、1次元モデルで は「1次元プロセスメッシュ」を設定し,その要 素に結晶破壊エネルギーが蓄積される。この1次 元プロセスメッシュは以下のように設定される。 即ち,注入イオンの初期位置が指定されている場 合はその初期位置のx,y座標を含むすべての要 素が選択される。初期位置が指定されている場 合は,マスクの中央のx,y座標を含むすべての 要素が選択される。

2.1.4.1 次元データの3次元への展開

1次元シミュレーショにより計算された不純物 分布と結晶破壊の1次元データは3次元プロセス メッシュの各要素に展開する必要がある。

不純物分布の1次元データは指定された z 座標 に対する濃度の値として保持されている。3 次元 プロセスメッシュの各要素に展開するため、まず 要素の重心の z 座標を内部に含む不純物濃度の 1 次元データの区間を探す。そしてその区間の両端 の不純物濃度の対数値から、重心の z 座標におけ る不純物濃度の対数値を内挿して求めることと した。1 次元不純物分布データを3 次元メッシュ への展開する例を図3に示す。



図 3 1 次元不純物分布データの 3 次元への展開 (Si(001)へ As を注入する場合)

1次元結晶破壊データは「1次元メッシュ」に蓄 積されている。ここで「1次元メッシュ」は材料 のXY面の中央のXY座標を含む四面体要素を 取り出して構成したものである。この「1次元メ ッシュ」を構成する各要素について,その重心座 標のZ座標から上下に四面体要素の「高さ」の1/2 分離れた上面と下面に挟まれた層を設定する。そ の上で、図4に示すように、元の3次元メッシュ の四面体要素の結晶破壊量として、その重心のZ 座標が含まれる層に対応した1次元メッシュの四 面体要素の結晶破壊量を代入することとした。厳 密には1次元メッシュの層が重なる場合に調整が 必要だが基本的にはこのようなアルゴリズムを 採用している。



図 4 1次元結晶破壊データの3次元への展開

2.1.5. MPI 並列化

3 次元のイオン注入機能と同様、MPI 並列化を 実装した。MPI 並列で実行した際の不純物分布を 図5に示す。不純物分布は,並列数に依存せずほ ぼ一致した。また,図6に示すように、並列数の 増加に対応してほぼ線形に計算速度が増加した。



図 5 MPI 並列数を変えたときの不純物濃度の 深さ依存性(SiC 基板への N 注入。エネ ルギーは 800keV、ドーズは 2.99e122 cm⁻ 2)



 図 6 図 5 のときの計算効率 (≡並列数1のと きの計算速度に対する比)

2.1.6. まとめ

新たに開発した1次元のイオン注入機能の機能 や実装において考慮した点として、注入イオンの 初期位置指定、1次元結晶破壊モデル、1次元デー タの3次元への展開、MPI並列化について紹介し た。

2.2. 電子阻止能モデルの高エネルギーへの対応2.2.1. 電子阻止能モデル

式(1)~(5)に Advance/TCAD に実装されている 電子阻止能モデルを示す。このモデルは局所モデ ル(Oen-Robinson モデル)と非局所モデル(LSS モデ ル)の混合モデルである(VIENNA モデル[1])。表 1 に電子阻止能モデルの変数の説明を示す。

$$\Delta E = \Delta E_{loc} + \Delta E_{nl} \tag{1}$$

$$\Delta E_{nl} = N_t \Lambda S_e[(1 - x_{loc}) + x_{loc} \left(1 + \frac{p_{cut}}{a_{OEN}}\right) exp\left(-\frac{p_{cut}}{a_{OEN}}\right)]$$
(2)

$$\Delta E_{loc} = x_{loc} \frac{S_e}{2\pi a_{OEN}^2} exp\left(-\frac{p}{a_{OEN}}\right) \tag{3}$$

$$a_{OEN} = \frac{fa_U}{0.3Z_1^b} \tag{4}$$

$$S_e = LSS_{CK} \frac{1.212Z_1^{7/6}Z_2}{\left(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3}\right)^{3/2}} \sqrt{\frac{E}{M_1}}$$
(5)

表 1 電子阻止能の変数

変数	説明	
ΔE	エネルギー損失	
ΔE_{loc}	局所モデルのエネルギー損失	
ΔE_{nl}	非局所モデルのエネルギー損失	
Nt	ターゲットの原子濃度[cm ⁻³]	
Λ	イオン進行距離[Å]	
x _{loc}	局所モデルの寄与率(0~1)	
p_{cut}	最大衝突半径	
aOEN	Oen-Robinson スクリーニング長	
aU	ZBL スクリーニング長	
f	調整パラメータ	
b	調整パラメータ	
LSSCK	非局所電子阻止能モデルの調整パ	
	ラメータ	
Z_1	イオンの原子番号	
Z_2	ターゲットの原子番号	
<i>M</i> 1	イオン質量数	

上述の電子阻止能は高エネルギー領域で実験 値とずれることが知られていて、このずれを補正 するために以下の式が報告されている[2]。表2に 式(6)の変数の説明を示す。

$$S_{e} = LSS_{CK} \frac{1.212Z_{1}^{7/6}Z_{2}}{\left(Z_{1}^{2/3} + Z_{2}^{2/3}\right)^{3/2}} \sqrt{\frac{1}{M_{1}}} \times \sqrt{E_{m}}$$

$$\times \left[\frac{1}{\left[E/E_{m}ln\left(\frac{E}{E_{m}} + \frac{E_{m}}{E} + e - 2\right)\right]^{\delta/2} + \left(\frac{E_{m}}{E}\right)^{\delta/2}}\right]^{1/\delta}$$
(6)

表 2 式(6)の変数

変数	説明
E_m	速度 $v_0 Z_1^{2/3}$ に対応するエネルギー。
	ここで、voはボーア速度
е	自然対数の底
δ	調整パラメータ

式(6)は *E*<<*E*_Mの範囲では、式(5)に一致する。 また、エネルギー領域はイオン速度によって以下 の3つの領域に分類される(iii が高エネルギー領域)。

i. $v < v_0$ ii. $v_0 < v < v_1$ iii. $v > v_1$

ここで、voはボーア速度、v1は、以下の式である。

$$v_1 = v_0 Z_2^{2/3} \tag{7}$$

表3に原子(B, N, Al, P, As)の $v_1 \& E_m \& e = v_1$ 。また、図7に原子番号 $\& E_m$ の関係をそれぞれ示す。 図7より、BやNの軽元素の場合、数千 keV を超えると修正版モデルの効果が現れてくると考えられる。AlやPの場合、数十 MeV を超える範囲で、As の場合、数百 MeV を超える領域で効果が現れてくる。

原子 原子 原子量 $v_1 \text{ [m/sec]}$ Em [keV] 番号 В 5 10.811 6.40E+6 2.29E+3 Ν 7 14.006 8.01E+6 4.65E+3 Al 13 26.981 1.21E+7 2.05E+4 Р 15 30.973 1.33E+7 2.84E+4

2.25E+7

1.97E+5

74.921

33

As

表 3 原子の V₁と E_m



図 7 原子番号と Em

2.2.2. 検証計算

イオン種 B、P、BF2、As に対してエネルギー 100、1000、2000 keV でイオン注入を実施して、高 エネルギー対応版の電子阻止能の動作確認を実 施した。その他の計算条件を表4に示す。動作確 認の結果を図8、図9に示す。Bの1000 keV と 2000 keV では、高エネルギー対応版の電子阻止能 の結果で既存のプロファイルよりも深く注入さ れることを確認した。一方、その他のイオン種と エネルギーの組み合わせについては、プロファイ ルに変化は見られなかった。これは、上述の通り、 B 以外の Em は数十 MeV 以上なので、2000 keV ま でのエネルギーでは効果が現れなかったと考え られる。

表 4 動作検証で使用した計算条件

パラメータ	設定
イオン種	B, P, BF2, As
エネルギー	100, 1000, 2000 keV
ドーズ量	3e12 [cm ⁻²]
計算粒子数	1e4



図 8 イオン種 B の 1000 keV での注入における 高エネルギー対応版の電子阻止能の効果



図 9 イオン種 B の 2000 keV での注入における 高エネルギー対応版の電子阻止能の効果

3. プロセス-デバイスコンバータの改良 3.1. プロセス-デバイスコンバータの機能

プロセス-デバイスコンバータはプロセスシミ ュレーションが出力する構造と不純物分布をデ バイスシミュレーションの入力ファイルに変換 するプログラムである。プロセスシミュレーショ ンは四面体要素を使用したメッシュであるのに 対し、デバイスシミュレーションは六面体要素を 使用した直交メッシュを用いることが多い。ここ では述べないが、従来のプログラムではこのメッ シュ要素の違いを主な原因としてアルゴリズム が複雑になりがちであった。今回大幅にアルゴリ ズムを改良したことで、従来よりも変換の精度が 向上し且つユーザーによる操作をサポートする 機能が充実した。

図 10 には改良したプロセス-デバイスコンバー タによるデータ変換の処理フローを示した。ここ では奥行き方向に同じ形状が続いているような 2 次元的な構造の変換について示しているが、3 次 元構造についても類似の方法を用いる。①はプロ セスシミュレーションが出力した構造とそのメ ッシュ分割を示している。②で抽出した XZ 断面 に対して、③で構造の輪郭を抽出している。④で は輪郭の屈折点をノット点として抽出し、⑤では ノット点を基に形成したブロックの材質を判定 している。⑥ではデバイスシミュレーション用の メッシュに分割し、各要素にプロセスシミュレー ションで計算した不純物濃度を割り当てる。





Î







図 10 改良したプロセス-デバイスコンバータに よるデータ変換の処理フロー

3.2.2 次元構造のプロセス-デバイス変換例

Advance/TCAD は 3 次元の TCAD であるが、2 次元構造でシミュレーションを行うことも多 い。ただしここでいう 2 次元構造とは、奥行方 向に最低でも 1 メッシュ分の厚みがあり同じ形 状が続いているような 3 次元形状を意味する。2 次元の場合には直方体要素と三角柱要素があれ ば、任意の 2 次元曲面を高精度に表現可能で処 理速度も高速になる。

プロセスシミュレーションで作成した構造は、 表面ラフネスを含むことが多く、このことが3次 元版の新コンバータで斜め形状や曲面形状を扱 うことを困難にしている。しかし、2次元版の新 コンバータでは、このような表面ラフネスの影響 をほとんど受けずに、形状抽出を行うことが可能 である。



図 11 プロセスシミュレーションの表面ラフネ スを含む構造(左)と、新コンバータで 形状抽出を行った結果(右)



図 12 プロセスシミュレーションの不純物濃度 分布(左)と、斜め形状・曲面形状に対 応した新コンバータによる不純物濃度マ ッピングの結果(右)

3.3.3次元構造のプロセス-デバイス変換例

三角柱要素や四面体要素を用いることで、平 坦な斜め形状や、曲面形状を表現することを目 的として開発を行っている。その他の大きな改 良点としては、材質毎の STL ファイルに変換し た材質表面の三角形セルデータを参照データと して、内外判定を行うことで高速処理を実現し ている。高速処理が可能になった分、複雑な形 状の抽出が可能となっている。

斜め形状を自動判別してできるだけ少ないノ ット点で形状抽出を行う機能や、その後のユーザ ーによるノット点の際にも適切に斜めや曲面の 形状を表現できるようにユーザー操作を補完す る機能も備えている。



図 13 XY面内に斜め形状を含む場合のコンバ ータでの形状抽出結果



図 14 プロセスシミュレーションによる表面ラ フネスを含む3次元構造の出力(左)に 対する、新コンバータによる形状抽出と 材質判定(右)の例



図 15 プロセスシミュレーションによる 3 次元 構造の出力(上)に対する、新コンバー タによる形状抽出と材質判定(下)の例

4. デポ・エッチ機能の改良

4.1. はじめに

Advance/TCAD プロセスシミュレータのデポ・ エッチ機能は、幾何学的な計算により半導体プロ セス工程のデポジションやエッチングを模擬す る機能である。特定の材質の構造のみを指定した デポ・エッチ、マスクによる領域指定、異方性を 考慮した方向による変化率の変更、などが可能で あり、様々な構造を高精度に表現できる。物理モ デルは使用していないので高速に結果を得られる。

今回、更なる機能向上を目的に改良を行った。 特に既存機能において改良すべきと考えている 以下の二点を対象とした。

- 既存のデポ・エッチ機能では、デポ・エッチ工程 開始前のメッシュを基にして、デポやエッチにより新たに生成される材質界面にメッシュの要素 (四面体)の三角形が一致するように、既存の要素を細分化していくというアルゴリズムを使用している。この場合、新たな界面の近傍に既存の要素の面がある場合には扁平な四面体が生成されることになってしまう。また、工程が進むにつれて要素数が大きくなっていく。
- 既存のデポ・エッチ機能は、ウエハ表面(X-Y面とする)と平行な面内にある斜めの材質界面を、マスクの定義により顕に指定して生成することが可能である。つまり、法線ベクトルのZ成分が0である任意の斜面は再現できる。一方、Z成分も任意の値を持つような斜面を再現する機能が実装されていない。

これらを改良するため、デポ・エッチ機能にお けるメッシュ分割におけるアルゴリズムを改良 した。なお、二番目の課題はメッシュ分割とは直 接関係ないが、実用上対象となる法線ベクトルの Z 成分が小さな斜面において一番目の課題にある 扁平な要素ができやすい、ということと関係して いる。

今回の改良により、扁平な要素ができにくく且 つ要素数もなるべく多くならないようなアルゴ リズムを採用した。次節以降にその要点を紹介する。

4.2. 初期メッシュ生成機能

初期メッシュの生成機能をデポ・エッチ機能に新た に追加した。従来は別に作られたメッシュをデポ・エッ チ機能の入力として与えるものであり、この初期メッシ ュの生成機能はなかった。具体的には立方体の8分 木メッシュを基にした以下のようなアルゴリズムを基に している。

- 8分木メッシュは系全体がちょうど入る立方 体から開始し、それを8個の立方体に分割し、 分割された一個の立方体をさらに8分割する、 ということを希望する空間解像度を表現で きるサイズの立方体が生成されるまで繰り 返す。各分割レベルでは、それぞれのサイズ の立方体が領域全体を埋め尽くせることに なる。これらの立方体が採用する立方体の候 補となる。
- ② まずは、最大の分割レベルの(=最小サイズの)の立方体のうち、物体の表面が一部でも含まれる(または接する)立方体を全て採用する。
- ③ 次に、最小サイズより一段階大きな各立方体のうち、その中に最小サイズの立方体が一つでも含まれる場合にはその立方体を採用する。これを、一段階ずつサイズを大きくしながら最大サイズまで繰り返す。
- ④ 次に、採用された大小様々な立方体について、 それぞれが隣接する立方体のサイズが自身 のサイズよりも2段階以上離れている場合に は、自信と隣接する立方体のうち小さい方の サイズの立方体を含む一段階大きな立方体 も追加で採用する。
- ⑤ 以上のようにして採用した大小様々な立方 体から成るメッシュから、その節点の接続を 変更することで四面体要素のメッシュを新 たに作成する。立方体は上で述べたような条 件を持つため、四面体の生成の仕方は限定さ れるため、比較的容易に四面体メッシュを生 成できる。

以上で基となる四面体メッシュが生成された

ことになる。このメッシュは物体の表面に細かな 四面体メッシュが貼られており表面から離れる と四面体要素のサイズが大きくなる。また、この 時点では表面と四面体要素の面は一致していない。

4.3. 材質境界面のメッシュ分割機能

四面体要素の初期メッシュが前節もしくは入力デ ータとして与えられた場合に、デポ・エッチにより新た に生じる材質境界面を生成するためのメッシュ分割 機能を改良した。具体的には以下のようなアルゴリズ ムを基にした。

- 四面体要素から成る初期メッシュについて、物体表面が通過する全ての辺とその切断点を特定する。この切断点の辺を構成する頂点から距離も計算しておく。
- ② 各頂点について、それを起点とした辺上に ある全ての切断点のうち、頂点からの距離 が一番近い切断点があらかじめ定めた値 以下である場合、その頂点を切断点に移動 させる。つまり物体表面に移動させること になる。移動させた頂点を起点とした他の 辺上の切断点は削除する。
- ③ 残った切断点が存在する辺を持つ各四面体要素について、切断点が新たな頂点となるように四面体を複数の四面体に分割する。分割の仕方が複数考えられる場合は分割後の四面体がなるべく扁平にならないような切断の仕方が採用される。

以上のようにして生成された四面体メッシュ は、物体の表面が四面体の面で覆いつくされてい ることになる。②では、対象となる四面体の形状 はその種類が限られているため、四面体を構成す る辺上の切断点に頂点を移動する場合にその移 動量に対するその四面体の扁平度合いは事前に 把握できる。また、頂点を移動させることで周囲 の四面体も変形するが、その変形する方向も何種 類かに限定されるため、それらの扁平度合いも事 前に把握できる。従って、これら事前に把握でき る扁平度合いから、頂点を切断点に移動される場

半導体プロセス・デバイスシミュレータ Advance/TCAD の改良

合の頂点から切断点への距離の許容範囲を事前 に決定しておくことができる。また、③について も四面体の分割の仕方は限られており、切断面が 通過する辺や点の組み合わせからなるべく扁平 が少ない分割を事前に把握しておける。

4.4. メッシュ分割事例

以上のアルゴリズムを適用した場合のメッシ ユ分割の例を図 16 と図 17 に示す。図 16 右には 従来のデポ・エッチ機能でのメッシュ分割も示し た。従来と比較して、任意の方向の法線ベクトル を持つ斜面を表現できている。また、この図の解 像度では判りにくいが、扁平な四面体要素ができ るのが抑えられている。



図 16 メッシュ分割事例1(右は従来の機能に よるメッシュ分割)



図 17 メッシュ分割事例 2 (右は埋め込み部分の形状)

4.5. 更なる改良とまとめ

前節までに述べた機能および事例は、今回紹介し た機能の基本的なアルゴリズムだけを適用した場合 である。例えば、系の形状が立方体であることが前提 となっていたり、材質界面が必ず最小の立方体であ ることを前提としていたり、等である。これらに関して はすでにアルゴリズムの改良を進めている。

本章では、Advance/TCAD プロセスシミュレータの デポ・エッチ機能について、主にメッシュ分割にお けるアルゴリズムの改良内容について紹介した。 この改良により、従来よりも扁平な要素ができに くく且つ要素数もなるべく多くならないように 改良した。

5. まとめ

本記事では、半導体のプロセスとデバイスのシ ミュレータである Advance/TCAD について、直近 で実施している機能改良の一部として、プロセス シミュレーションのイオン注入機能、プロセス・ デバイスコンバータ、プロセスシミュレーション のメッシュ分割における改良について紹介した。 デバイスシミュレータの改良や機能追加など、こ こで紹介していない開発も含めて、今後も精力的 に開発を続けていく予定である。

参考文献

- G. Hobler et al., Boron channeling implantations in silicon: Modeling of electronic stopping and damage accumulation, J. Appl. Phys., 1995.
- [2] S. Tian, Predictive Monte Carlo ion implantation simulator from sub-keV to above 10 MeV, J. Appl. Phys., 2003.
- ※ 技術情報誌アドバンスシミュレーションは、 それぞれの文献タイトルの下に記載した DOI から、PDF ファイル (カラー版) がダウンロー ドできます。また、本雑誌に記載された文献は、 発行後に、JDREAMIII(日本最大級の科学技術 文献情報データベース) に登録されます。