

3次元半導体デバイスシミュレーションの数値計算法の検討

日立中研 鳥谷部 達 (Toru Toyabe)

1. まえがき

L S I 研究開発において、半導体デバイスの動作解析や設計に数値シミュレーションが用いられるようになってきた。特に、V L S I に使われるような動作層が $1\mu m$ 以下の微細デバイスの特性を予測するには3次元シミュレーションが必要である。本報告では、3次元デバイスシミュレーションで必要となる非対称大型行列の高速で安定な数値解法を検討した。これに基づき、バクトルプロセッサを備えたスーパーコンピュータを用い、実用的な3次元半導体デバイスシミュレーションが可能となったことを示す。

2. 半導体デバイス解析の基本方程式

半導体デバイスシミュレーションの概念を図1に示す。入力は半導体デバイスの構造、デバイス内の物理的状态を支配する方程式、種々の物理パラメータのモデルである。これから大きなスパース行列で表わされる連立一次方程式を導き、数値解法を用いて解く。出力はデバイス内部の物理量分布

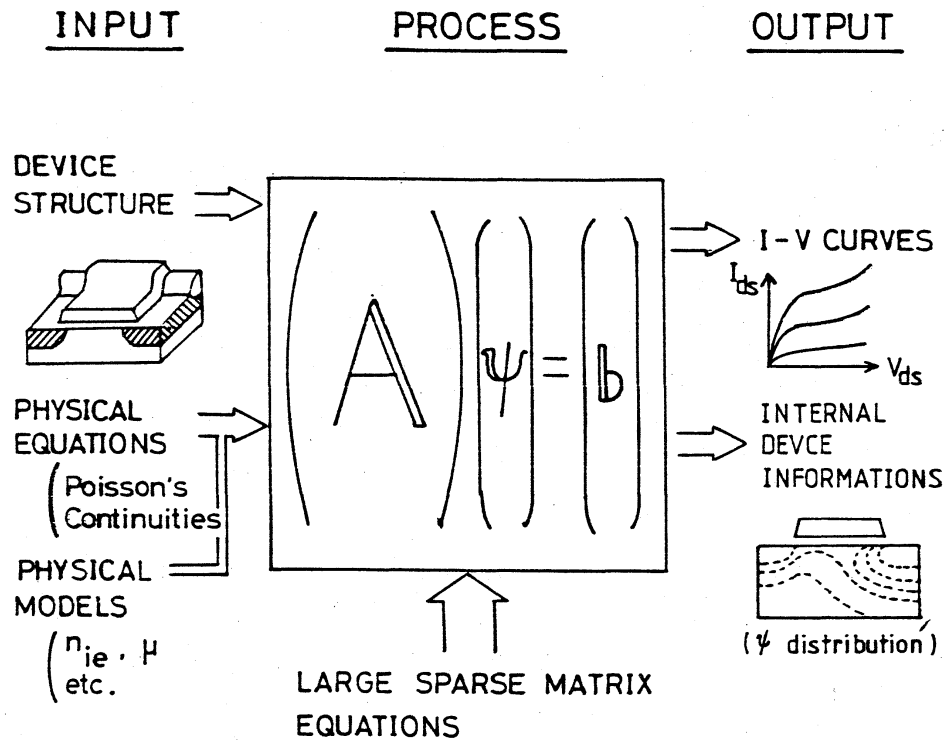


図1. デバイスシミュレーションの概念.

と、それをもとにして求めることのできる電気的特性（たとえば電流 - 電圧特性）である。

解析対象の例としてバイポーラトランジスタの構造を図2に、C-MOSの構造を図3に示す。

半導体デバイス内部の電位 ψ 、電子密度 n 、正孔密度 p を決定する基本方程式を表1に示す。式中に現れる、移動度 μ 、有効真性キャリア密度 n_{ie} 、キャリア生成率 G 、キャリア再結合の割合 R などの物理パラメータは不純物濃度、電界 E 、電流密度 J に関係する。このことによっても方程式は非線型となるが、それは方程式系が本質的に持つ非線型性に比べ

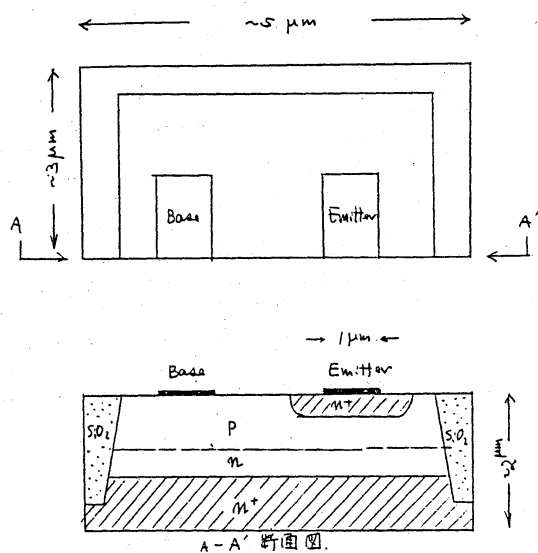


図2. バイポーラ トランジスタの
上面図と断面図

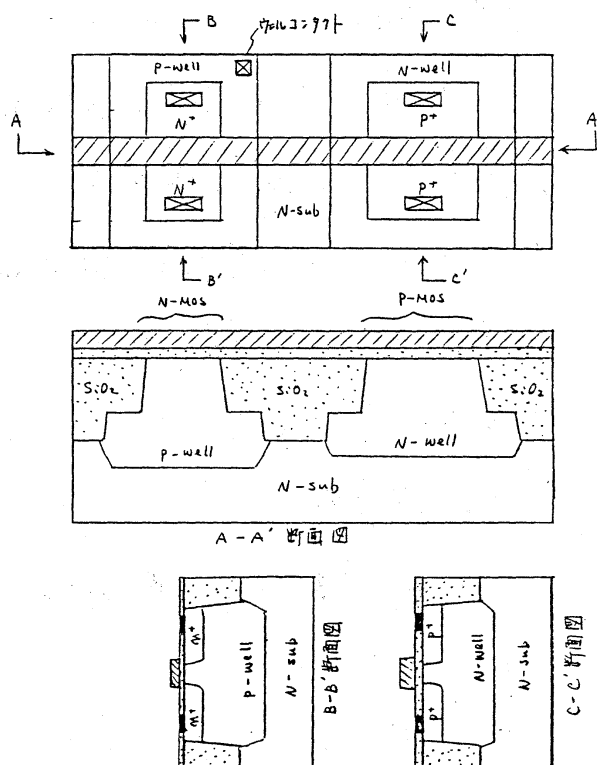


図3. C-MOS の上面図と
断面図

表1. デバイスシミュレーションの基本方程式

	ポアソン方程式	電流連続方程式
半導体	$\epsilon \Delta \psi = q(n - p - N_D + N_A)$	$\frac{\partial n}{\partial t} = \nabla \cdot (D_n \nabla n + \mu_n n E) + G - R$ $\frac{\partial p}{\partial t} = \nabla \cdot (D_p \nabla p - \mu_p p E) + G - R$
絶縁体	$\epsilon \Delta \psi = 0$	_____
金属	$\psi = \text{given}$	_____

ψ : 電位 n : 電子密度 p : 正孔密度

N_D, N_A : イオン化不純物濃度 (ドナー, アクセプタ)

D, μ : キャリアの拡散係数と移動度, G : キャリア生成率

R : キャリア再結合の割合

ると弱い。

上記の方程式系を解く計算処理の流れは図4のようになる。各方程式を順次解き、それを反復することにより収束させる。

3. 差分化

電位 ψ をその近似解 ψ_0

で

$$\psi = \psi_0 + f \quad (1)$$

のように表わし、ポアソン

方程式を差分化すると次式のようになる。

$$\begin{aligned} & \tilde{h}_y(j) \tilde{h}_z(k) \left(\frac{f_{i+1,j,k} - f_{i,j,k}}{h_x(i)} + \frac{f_{i-1,j,k} - f_{i,j,k}}{h_x(i-1)} \right) \\ & + \tilde{h}_z(k) \tilde{h}_x(i) \left(\frac{f_{i,j+1,k} - f_{i,j,k}}{h_y(j)} + \frac{f_{i,j-1,k} - f_{i,j,k}}{h_y(j-1)} \right) \\ & + \tilde{h}_x(i) \tilde{h}_y(j) \left(\frac{f_{i,j,k+1} - f_{i,j,k}}{h_z(k)} + \frac{f_{i,j,k-1} - f_{i,j,k}}{h_z(k-1)} \right) \\ & = b_{i,j,k} \end{aligned} \quad (2)$$

$$(i=1, 2, \dots, N_x; \quad j=1, 2, \dots, N_y; \quad k=1, 2, \dots, N_z)$$

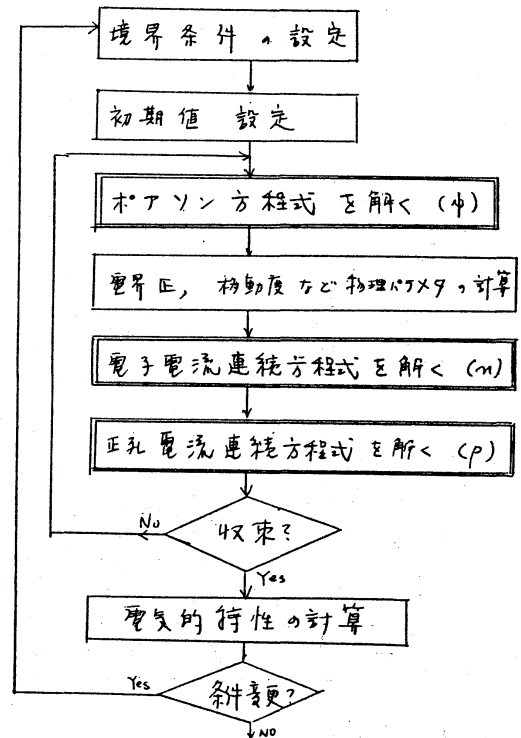


図4. 計算処理の流れ

ただし、 $h_x(i)$, $h_y(j)$, $h_z(k)$ はそれぞれ、 x , y , z 方向のメッシュ間隔である。また、

$$\begin{aligned}\tilde{h}_x(i) &= \frac{1}{2} (h_x(i) + h_x(i-1)), \quad \tilde{h}_y(j) = \frac{1}{2} (h_y(j) + h_y(j-1)) \\ \tilde{h}_z(k) &= \frac{1}{2} (h_z(k) + h_z(k-1))\end{aligned}\quad (3)$$

である。以上を行列形式で表わすと、

$$\begin{bmatrix} 1 & & & \\ & 0 & & \\ & & \ddots & \\ & & & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f_{11} \\ f_{21} \\ \vdots \\ f_{N1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_{11} \\ b_{21} \\ \vdots \\ b_{N1} \end{bmatrix}\quad (4)$$

のようになる。この行列は対称行列である。

電流連続方程式については、解く際の未知数の選択に幅がある。キャリア密度 n と p は擬フェルミポテンシャル ϕ_n, ϕ_p と次式

$$n = n_i e^{\psi - \phi_n}, \quad p = n_i e^{\phi_p - \psi} \quad (5)$$

表 2. 電流連続方程式の解法

	方式	対象とする 未知量	方程式		行列	変数の ダイナミック レンジ
1	η - ρ	$e^{-\phi_n} (= \eta)$ $e^{\phi_p} (= \rho)$	$\nabla \cdot (\mu_n n i e e^{\psi} \nabla \eta) = G - R$	線型	対称	10^{1000}
2	n - p	n, p	$\nabla \cdot (\mu_n n i e e^{\psi} \nabla (\frac{e^{-\psi}}{n i e} n)) = G - R$	線型	非対称	10^{26}
3	ϕ_n - ϕ_p	ϕ_n, ϕ_p	$\Delta \phi_n + \nabla \cdot \left\{ \psi - \phi_n + \ln(\mu_n n i e) \right\} \nabla \phi_n = \frac{R - G}{\mu_n n}$	非線型	非対称	10^3

で関係づけられる。このことから、表2のように、3種類の方式が考えられる。

第1の η - ρ 方式は行列が対称となり、解きやすいという利点があるが、未知量自体の変化のダイナミックレンジが非常に大きいという欠点がある。 $e^{-\phi_n}, e^{\phi_p}$ の中の ϕ_n, ϕ_p はボルツマン電圧 kT/q ($= 25mV$; 室温)で正規化しているために、たとえば印加電圧が10Vのときでも、 $\phi_p = 400$ となることによる。

第2の n - p 方式は方程式は線型で変数のダイナミックレンジも 10^{26} 程度とそれほど大きくない。必要となるのは非対称行列の解法である。

第3の ϕ_n - ϕ_p 方式は方程式が非線型となる欠点があり、

実際例での検討でも殆ど収束解が得られないという不満足な結果しか得られなかった。

以上から、大型行列の解法、特に非対称な場合の解法が重要である。

4. 大型行列解法

ポアソン方程式からの行列は対称であるので、既に定評のある ICCG 法を用いて解くことにした。電流連続方程式については、 $n-p$ 方式を可能とするために、以下の 4 つの非対称行列解法、

(A) BCG 法¹⁾

(B) CR 法²⁾

(C) SMICCG 法³⁾

(D) 非対称用 ICCG 法⁴⁾

を検討した。

$Ax = b$ (A : 非対称行列) に対する解法のアルゴリズムは次のとおりである。

BCG 法

$$A = LU - R$$

$$A' = (LU)^{-1}A$$

$$x_0, \quad r_0 = (LU)^{-1}(b - Ax_0)$$

$$p_0 = r_0^* = p_0^* = r_0$$

$$\text{反復部分} \left\{ \begin{array}{l} \alpha_k = (r_k, r_k^*) / (A' p_k, p_k^*) \\ x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k \\ r_{k+1} = r_k - \alpha_k A' p_k \end{array} \right.$$

$$\begin{cases}
 r_{k+1}^* = r_k^* - \alpha_k (A')^T p_k^* \\
 \beta_k = (r_{k+1}, r_{k+1}^*) / (r_k, r_k^*) \\
 p_{k+1} = r_{k+1} + \beta_k p_k \\
 p_{k+1}^* = r_{k+1} + \beta_k p_k^*
 \end{cases}$$

CR 法

$$x_0, r_0 = (LU)^{-1}(b - Ax_0)$$

$$p_0 = r_0$$

$$\begin{array}{l} \text{反} \\ \text{復} \\ \text{部} \\ \text{分} \end{array}
 \begin{cases}
 \alpha_k = (r_k, A'p_k) / (A'p_k, A'p_k) \\
 x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k \\
 r_{k+1} = r_k - \alpha_k A'p_k \\
 \beta_{ik} = (A'r_{k+1}, A'p_i) / (A'p_i, A'p_i) \\
 \quad (i = k, k-1, k-2, \dots, k-m) \\
 p_{k+1} = r_{k+1} - \sum_{i=k-m}^k \beta_{ik} p_i
 \end{cases}$$

SMICCG 法

$$\tilde{A} = A^T (LU)^{-T} (LU)^{-1} A$$

$$\tilde{b} = A^T (LU)^{-T} (LU)^{-1} b$$

$$x_0, r_0 = \tilde{b} - \tilde{A}x_0$$

$$p_0 = r_0$$

$$\begin{array}{l} \text{反} \\ \text{復} \\ \text{部} \\ \text{分} \end{array}
 \begin{cases}
 \alpha_k = (r_k, r_k) / (p_k, \tilde{A}p_k) \\
 x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k \\
 r_{k+1} = r_k - \alpha_k \tilde{A}p_k
 \end{cases}$$

$$\begin{cases} \beta_k = (r_{k+1}, r_{k+1}) / (r_k, r_k) \\ p_{k+1} = r_{k+1} + \beta_k p_k \end{cases}$$

非対称用 ICCG 法

(非対称な A に ICCG 法 使用)

$$x_0, r_0 = b - Ax_0$$

$$p_0 = (LU)^{-1} r_0$$

反復部分

$$\begin{cases} \alpha_k = (r_k, (LU)^{-1} r_k) / (p_k, A p_k) \\ x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k \\ r_{k+1} = r_k - \alpha_k A p_k \\ \beta_k = (r_{k+1}, (LU)^{-1} r_{k+1}) / (r_k, (LU)^{-1} r_k) \\ p_{k+1} = (LU)^{-1} r_{k+1} + \beta_k p_k \end{cases}$$

まず、人為的なテスト行列として、式(4)のような形の対称行列の一部を変更して、非対称要素の割合を10%、50%、100%になるようにしたものを用意した。これに3解法を適用して最大剰余が反復計算により減少するのをみたのが図5である。最大剰余が一定値($=10^{-3}$)以下になる反復回数で比べると、

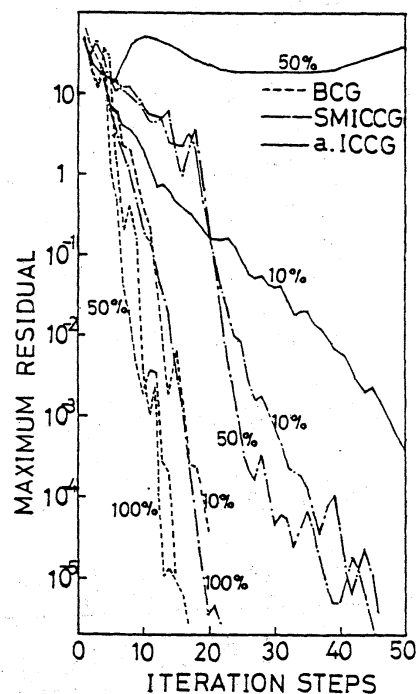


図5. 非対称行列解法の収束性の比較

BCG法, SMICCG法, 非対称用ICCG法で1:2.5:>5の比となった。また、BCG法とCR法を比べた結果を図6に示す。

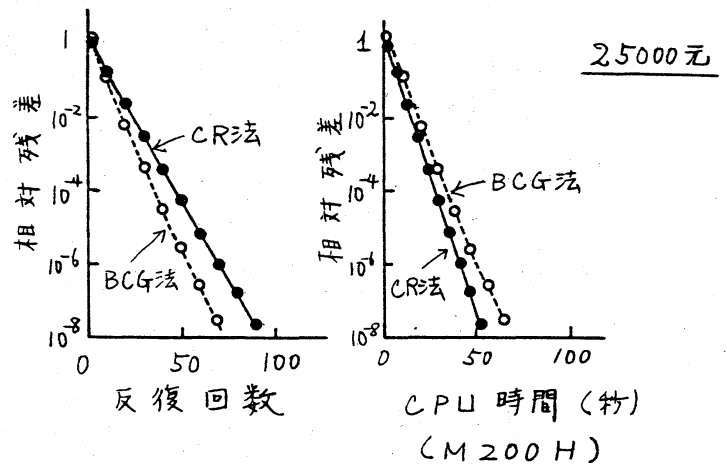


図6. BCG法とCR法の比較

収束反復回数では1:1.3の比で、やはりBCG法が良い。しかし、反復1回あたりのCPU時間でみるとBCG法、CR法、SMICCG法、非対称用ICCG法で5:3:5:3の比となった。したがって、高速性の点ではCR法がBCG法に勝ることも分った。

5. デバイス解析における

解法の検討

まず、pn接合ダイオ

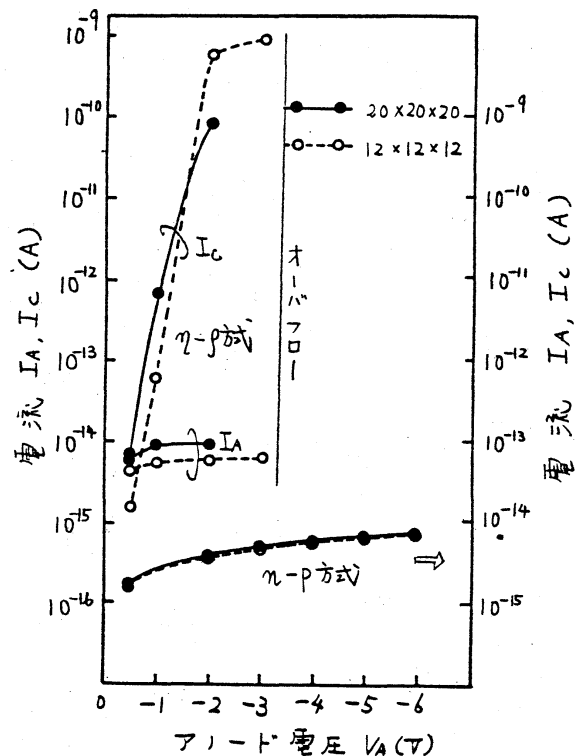


図7. ダイオードの逆方向電流電圧特性.

η -p方式とn-p方式の比較.

ードの逆方向電流電圧特性計算の例で $n-p$ 方式と $n-p$ 方式を比較した結果を図7に示す。ダイオードのアノード電流 I_A とカソード電流 I_C は一致しなければならないのに対し、 $n-p$ 方式では収束解の精度が十分ではなく I_C と I_A が大きく食い違ってしまった。これに対し、 $n-p$ 方式は、 I_C と I_A が一致し、その値も妥当なものであった。これにより、 $n-p$ 方式を採用することにした。

次に MOSFET の例で、BCG法とCR法を比較した結果を図8に示す。ゲート電圧 V_G を $0.5V$ から $6V$ まで $0.5V$

V ステップで増加させたときの各バイアス点で収束解を得るのに要した

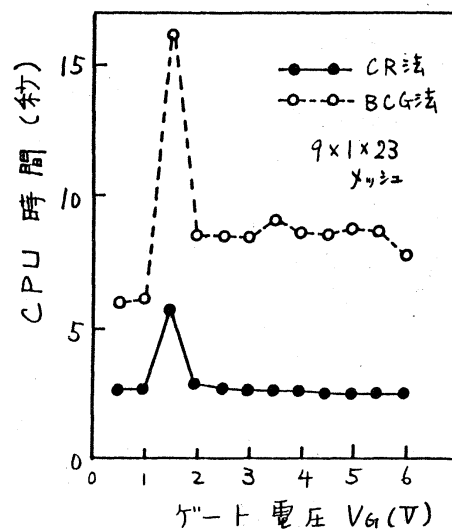
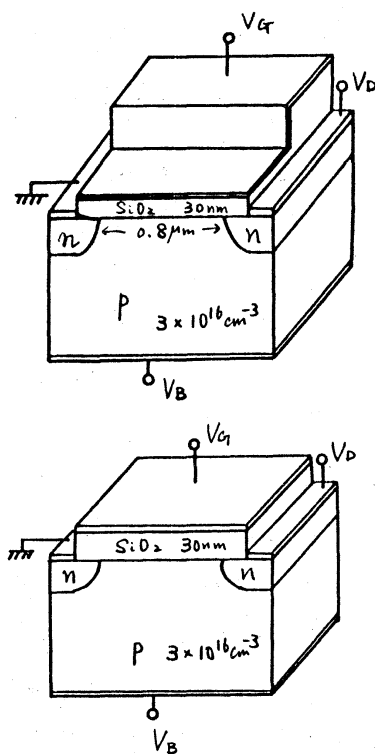


図8. MOSFETの構造と、MOSFETの I_D-V_G 特性計算に要したCPU時間 (M180)

CPU 時間を示している。この例ではCR法が2.7倍高速であり、正しい解を与えた。

次に、バイポーラトランジスタの電流電圧特性を求めたのが図9である。コレクタ電流 I_c は双方とも正しく求められたがベース電流 I_B が低電流領域でCR法の精度では正確に求められなかった。すなわち、CR法の場合には、 I_B を求めるときのベース電極をとりかえる積分面を変化させると、 I_B の値が変わって

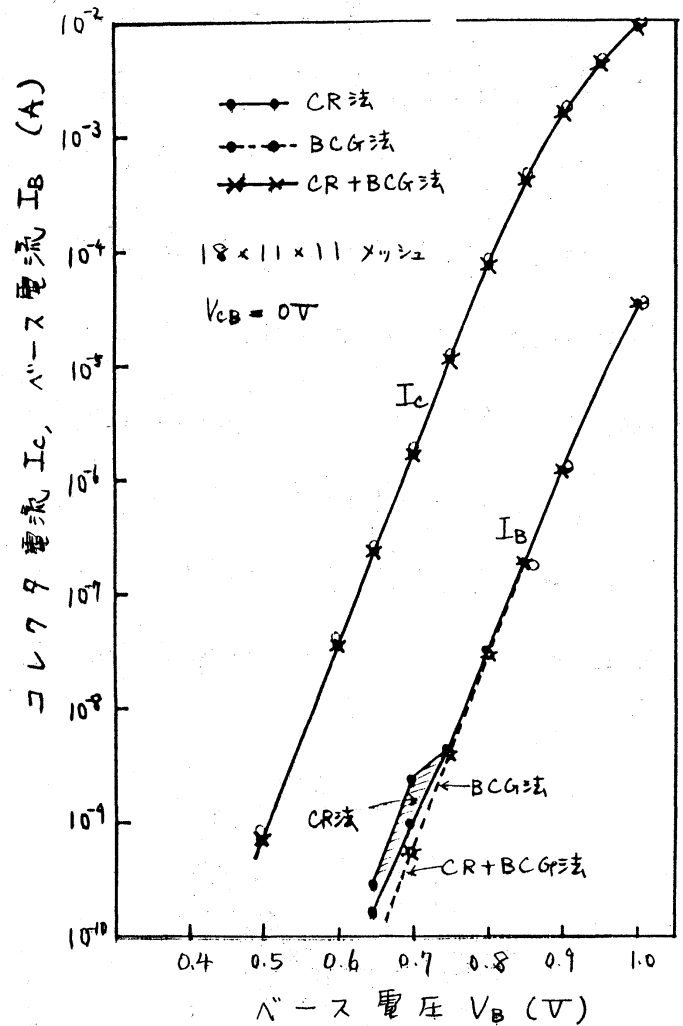


図9. バイポーラトランジスタの電流電圧特性。

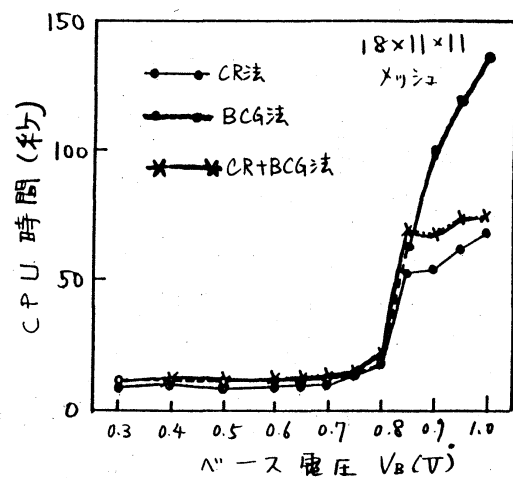


図10. バイポーラ解析のCPU時間 (M200H)

し、このことを図9に斜線部の幅をもって示した。これに対し、BCG法ではそのようなこともなく妥当な結果が得られた。CR法の場合に生じた現象が生じる原因は、電流密度を求める差分において10桁以上の桁落が生じているために、解に非常に高精度が要求されるためである。

しかし、図10に示したように、BCG法ではバース電圧 V_B の高い場合に計算時間が長くなるのが難点である。そこで、図4の反復ループにおいてBCG法とCR法を併用することを試みた結果、バース電流も正しく求められ(図9)、同時に計算時間も比較的短かく抑えることができた(図10)。

6. バクトル計算による

高速化

バクトルプロセッサを備えたスーパーコンピュータS-810の能力を十分に活用し、3次元シミュレーションを高速化することにより、その実用化を図ることができ

る。ここでは、

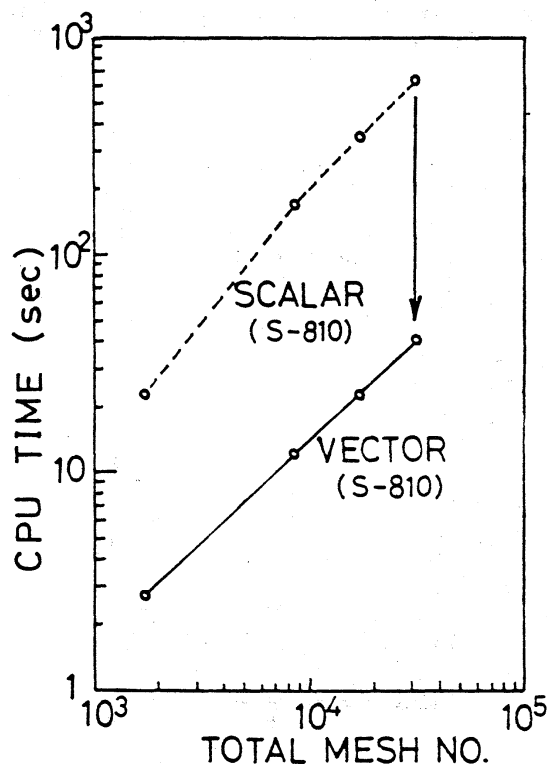


図11. S-810によるCPU時間

(1) 3次元変数を1次元ベクトル化することによる、ベクトル長の拡大.

(2) リストベクトルを使用した、PCG法中のLU分解のベクトル化コーディング.

により、プログラム全体としてのベクトル化率を97%にまで高めることができた。その効果を図11に示す。S-810をスカラーモードとベクトルモードで用いて、メッシュ数を2000から30000まで変えた場合の1バイアスあたり収束計算に要するCPU時間を示す。ベクトル化による高速化は16倍であった。M200Hとの比較では約30倍の高速化を得た。したがって、従来の2次元シミュレーション

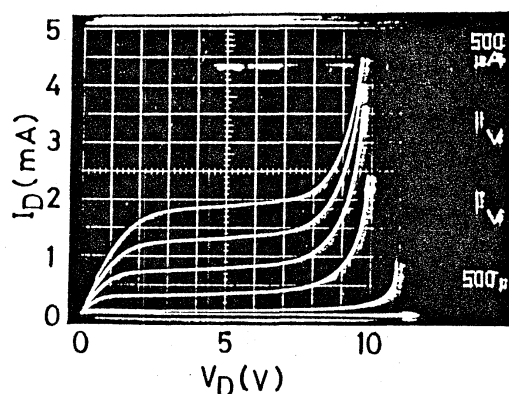
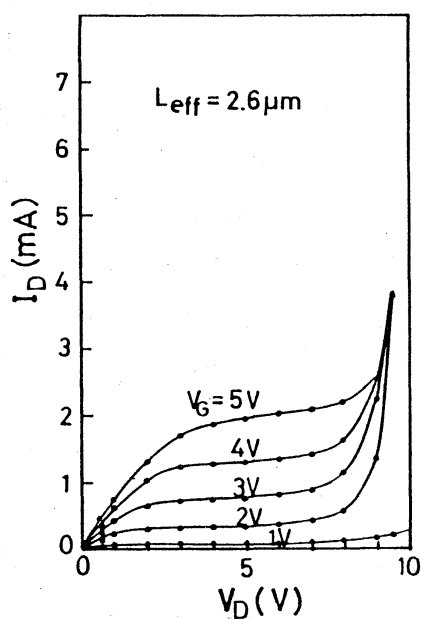


図12 MOSFETのアバランシェ降伏特性(計算と実験)

(通常 2000 メッシュ程度) と同程度の容易さで 3次元シミュレーション (20000 メッシュ以上) を行うことが可能となった。

最後にシミュレーション結果の 1例として、MOSFET のアバランシェ降伏特性のシミュレーションと実験結果との比較を図 12 に示す。キャリア生成などの物理パラメータを内蔵し、3次元構造を入力して計算することにより、広範囲のデバイスに対し精度良い特性シミュレーションを行うことが可能である。

7. 結論

3次元半導体デバイスシミュレーションにおける大型行列解法を検討し、ポアソン方程式には ICCG 法、電流連続方程式には BCG 法と CR 法の併用が良いことを示した。

また、バクトル化率 97% に達するバクトル化コーディングにより 16 倍の高速化を得た。これらの数値計算技術のもとに、3次元構造の MOSFET、バイポーラトランジスタ、ダイオードなどの実用的レベルでのシミュレーションが可能となった。

参考文献

- 1) R. Fletcher, "Conjugate Gradient Methods for Indefinite

- Systems," Proc. Dundee Biennial Conference Numerical Analysis, G.A. Watson, ed. Springer-Verlag New York 1975
- 2) Y. Saad, SIAM J. Numer. Anal. vol. 19 pp. 485-506 (1982)
- 3) O. Axelsson and I. Gustafsson, J. Inst. Maths. Applies, vol. 23 pp. 321-337 (1979)
- 4) 和田, 檀, 電子通信学会 半導体トランジスタ研究会資料 SSD 82-21 (1982)