

## 半導体モデリング・シミュレーション技術の現状と将来展望

阪大 小田中 紳二

本シンポジウムは、春季講演会期間中の 2013 年 3 月 27 日に開催され、9 件の招待講演によって、集積デバイスに関するモデリング・シミュレーション技術の現状と将来展望を議論した。本テーマは、いわゆるマルチ物理、マルチスケールモデリングをリーディングする科学技術分野の一つであり、半導体材料・プロセスシミュレーションから、電子輸送モデリング、大規模デバイスや配線信頼性シミュレーション、コンパクトモデルまでが、各階層のモデリングの第一人者によって網羅された。

講演会は 3 つのセッションから構成された。その第 1 において、広島大学より、HiSim プロジェクトによって世界をリードしてきた研究成果を基に、半導体デバイスのコンパクトモデルが議論された。まず、驚かされるのは、コンパクトモデルが回路設計モデルとしての役割だけでなく、半導体デバイス内のキャリアダイナミクスを捉える重要な手法になってきたということである。産業界の現状を考え合わせれば、半導体デバイス開発にとっても今後キーとなる技術である。さらに、デバイス・配線設計に関して東芝と STARC から発表があった。東芝からの発表では、微細化が進む配線の LER (Line edge roughness) が抵抗に及ぼす効果が MC 法によってシミュレーションされ、理論的解析と現状構造における特性予測について議論された。集積システムの微細化にとっては、配線やパターン設計技術は重要で、産業界がリードする研究の一つである。また、Beyond Moore 技術の方向として、イメージセンサー、パワーIGBT、マイコンフラッシュデバイスの開発が注力されている。これらのデバイス開発にとって必要となる大規模・大領域・高速計算技術について、STARC より発表があった。チップレベル大領域 TCAD シミュレーション技術、C++API 技術による新デバイスモデルの回路設計への取り込みが進められている。さらに、京コンピュータによる大規模高速計算の試みが発表され、その実用化が大きく期待される。

第 2 には、第一原理計算による半導体材料設計と KMC 法による不純物拡散モデリングが議論された。実空間密度汎関数法による第一原理計算を大規模非線形固有値問題の並列化手法によって京コンピュータで実現した報告が東大よりあった。この研究は、10 万原子レベルのシミュレーションを実現し、SC コンファレンスでゴードンベル賞を獲得したものである。現在、京コンピュータ 3840 ノードで 2 万~4 万原子レベルのシミュレーションが実用段階にあるとのことであった。不純物拡散モデリングに関しては、SiGe チャネルの接合プロファイルを KMC 法によって最適化する研究発表がパナソニックよりあった。Ge 組成濃度が高くなると、拡散は Vacancy 依存になり、As 拡散の影響が大きくなる。一方、KMC 法によって、Ge 存在下でのイオン注入ダメージ、{311}欠陥、BI クラスタ組成が系統的に調べられ、ボロン TED 効果は抑制され、活性化率も向上することが示された。

第 3 は、ミニシンポジウムをなすものであり、まず、東大より微細 MOSFET の将来動向

の発表があった。CMOS デバイスは薄膜化や立体化と共に、高移動度半導体チャネルの研究が進んでいる。そのため、Ge/III-V チャネル形成技術の進展と共に、2D 材料(MoS<sub>2</sub>, Ws<sub>2</sub>, MoSe<sub>2</sub> など)の研究機運も高まっている。この発表に引き続き、電子輸送に関する 3 つの物理モデルが議論された。筑波大学より、チャネルのソース端・ドレイン端での散乱機構は輸送特性に大きく影響し、ナノスケールデバイスにおいても散乱を含む輸送方程式に基づいた特性解析の必要性が報告された。このことは半導体デバイス開発にとって、過去 10 年と同様に今後も重要な指針である。さらに、ソース・ドレイン領域におけるクーロン散乱過程を考慮しなければ、正しい境界条件を設定できないという物理モデル上の問題が生じることが指摘された。量子輸送モデリングに向けて、非平衡グリーン関数法を用いた電子輸送シミュレーションの進展について大阪大学より報告があった。このモデルによって直接トンネル電流を含んだ 5nm デバイスの特性が実測とも比較され、この手法が原子論的モデルとの親和性がよいことも指摘された。最後に、量子効果と散乱効果を取り扱うマクロモデルとして、量子流体モデルの重要性が大阪大学より報告され、コンパクトモデルとの連動性も指摘された。その階層モデルの一つである 4 モーメント量子輸送モデルによって Si, Ge MOSFET の特性結果が初めて報告された。

今回、参加者は延べ 100 人余りであり、このテーマの関心の深さが再認識されると同時に、多くの参加者と共に熱心な議論が行われ、多くの知見を共有できたことは大きな成果であった。