

# 自動微分を搭載したTCADとその応用

1. 背景  
今後のトランジスタ
2. Technology CAD (TCAD)に要求されるもの
3. 次世代TCADの取組み

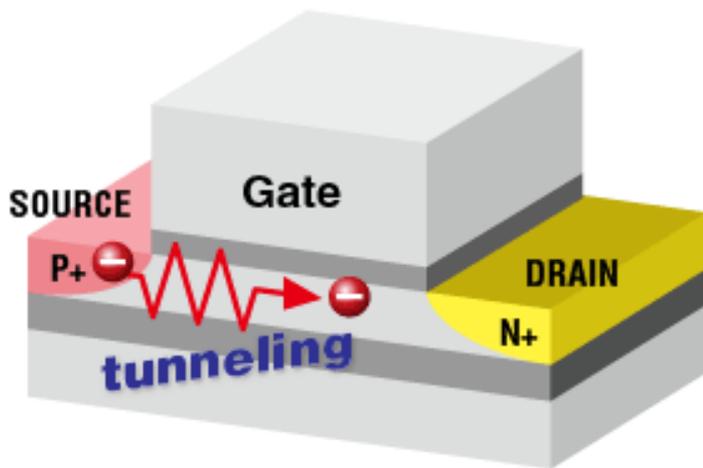
産総研 情報技術研究部門・ナノエレクトロニクス研究部門

# 今後のトランジスタ

電源電圧  $V_{DD}$  を低く抑えたい

集積度を上げたい

新構造・新材料・新原理の導入



新動作原理CMOS

<http://www.yokoyama-gnc.jp/research/cmos.html>

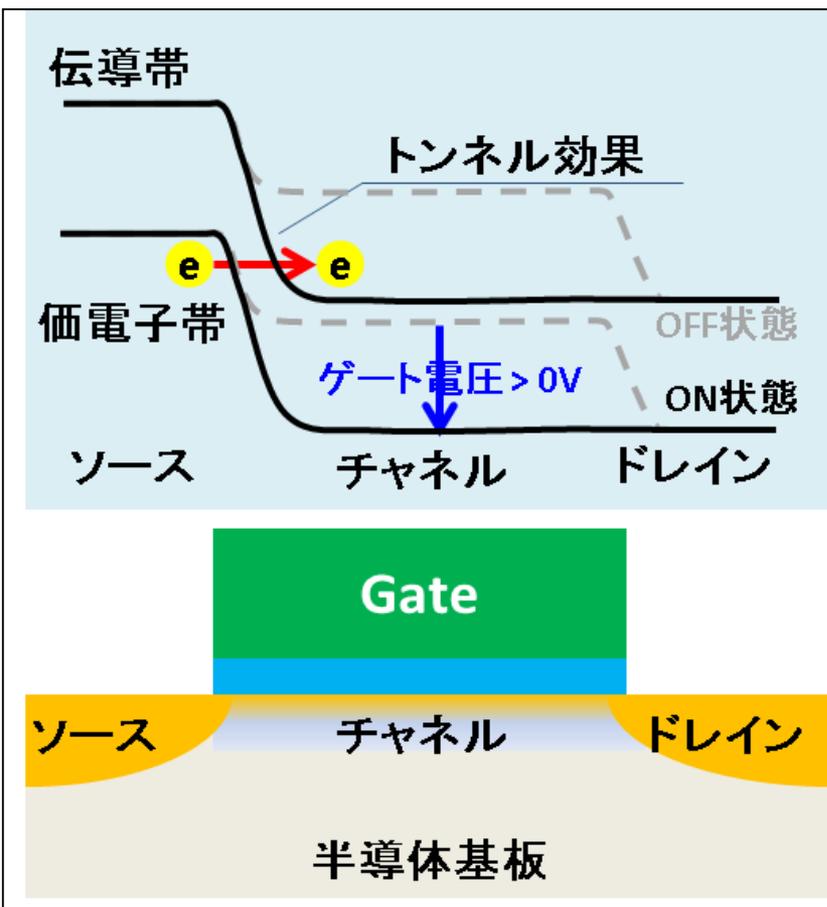
## 三次元積層



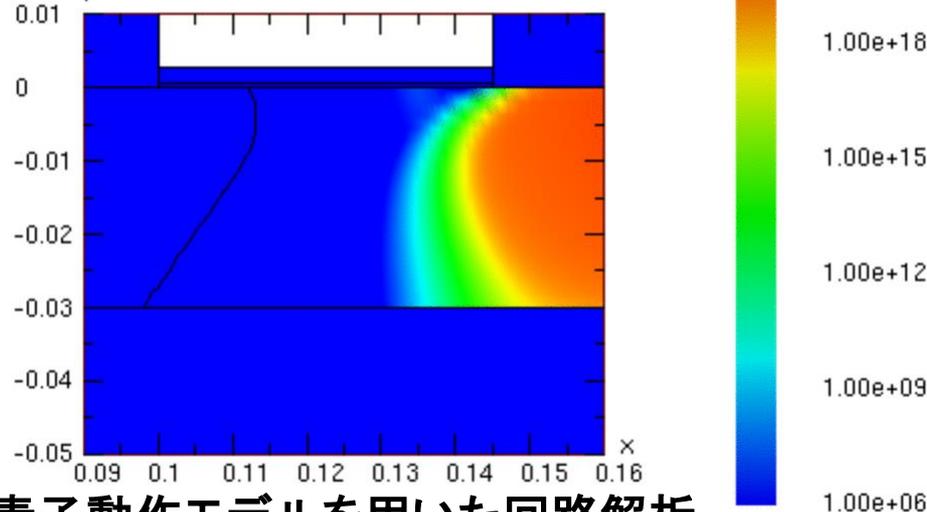
[http://www.aist.go.jp/aist\\_j/press\\_release/pr2014/pr20140609\\_2/pr20140609\\_2.html](http://www.aist.go.jp/aist_j/press_release/pr2014/pr20140609_2/pr20140609_2.html)

# トランジスタの研究が大きく変化

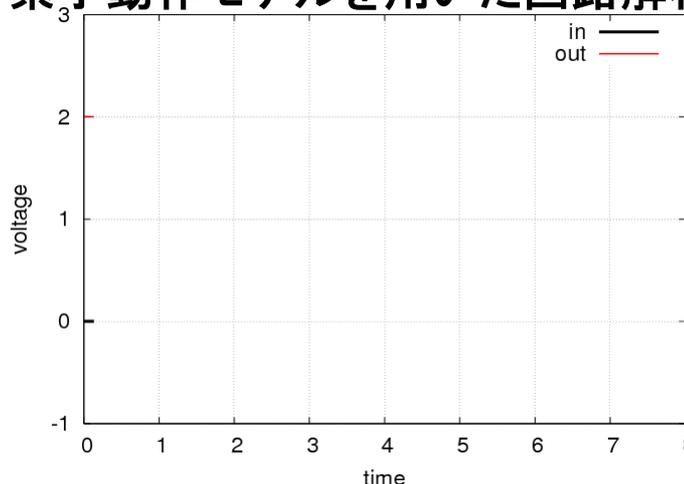
# 新原理デバイスのモデリング



## トンネルFETのデバイスモデリング

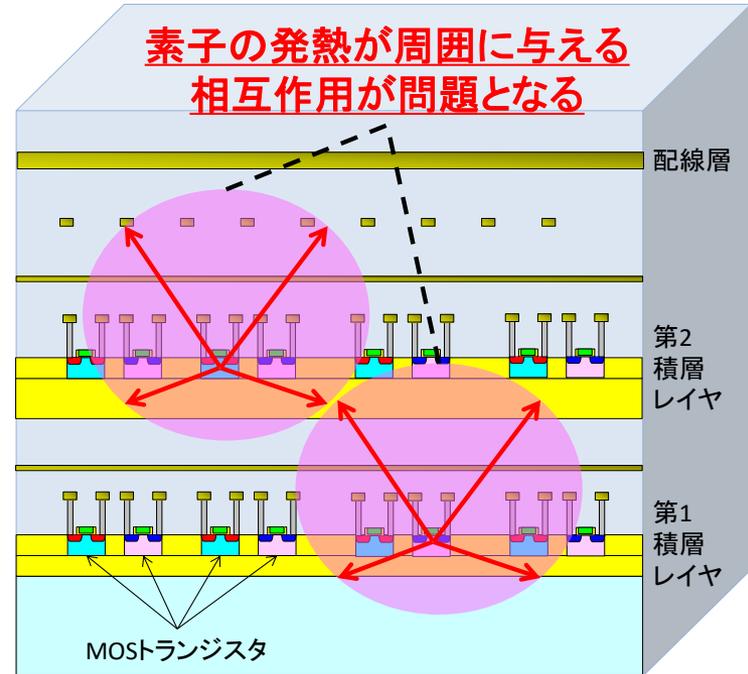
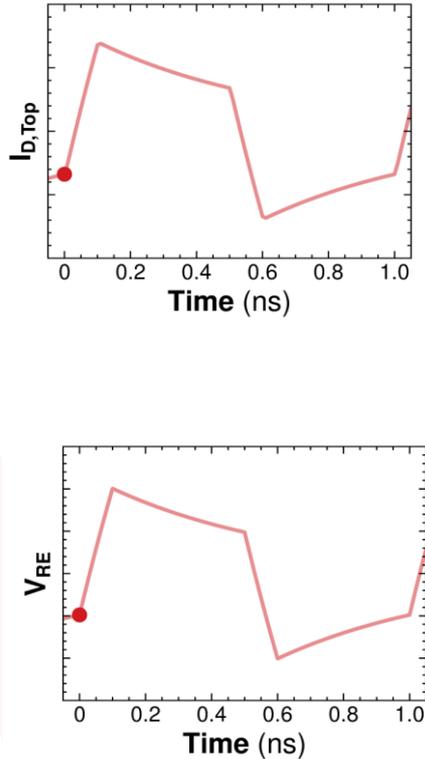
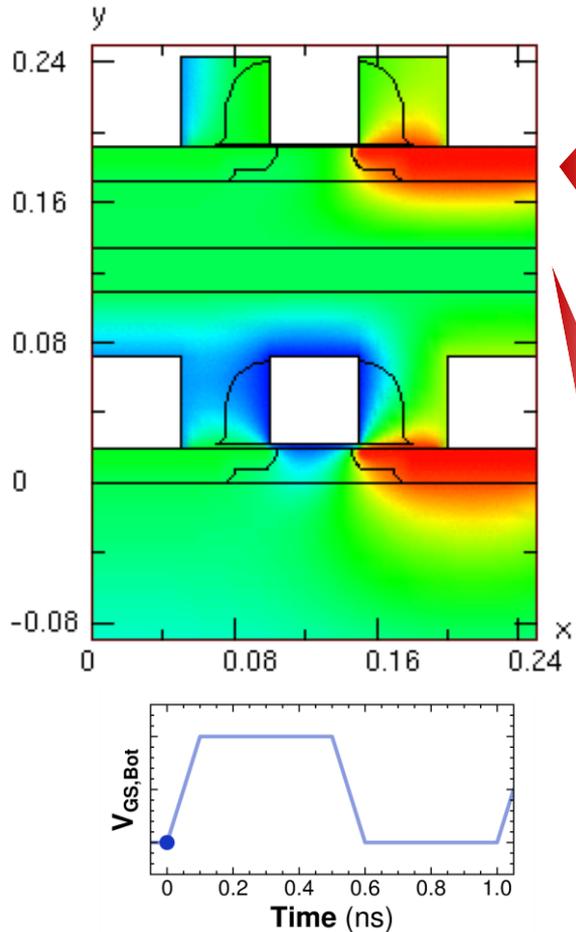


## 素子動作モデルを用いた回路解析



# TCADで新原理デバイスのモデル化

# 積層3次元集積



素子の発熱が周囲に与える相互作用が問題となる

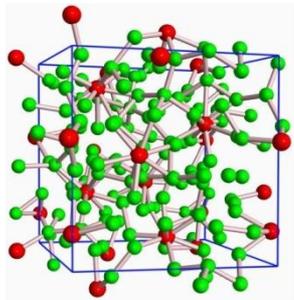
静電ポテンシャルの相互作用

熱の相互作用

## 積層デバイス間の相互作用大規模解析

# TCADに必要とされるもの

新構造  
新材料  
新原理



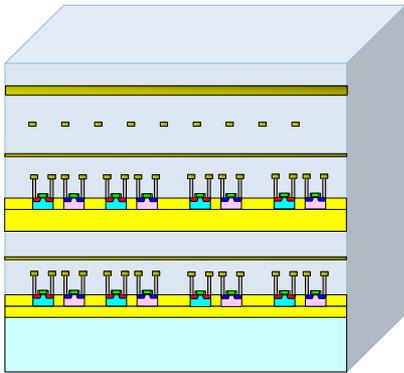
第一原理計算

新規な物理モデルを組み込む



自動微分

三次元集積化



大規模な相互作用の解析

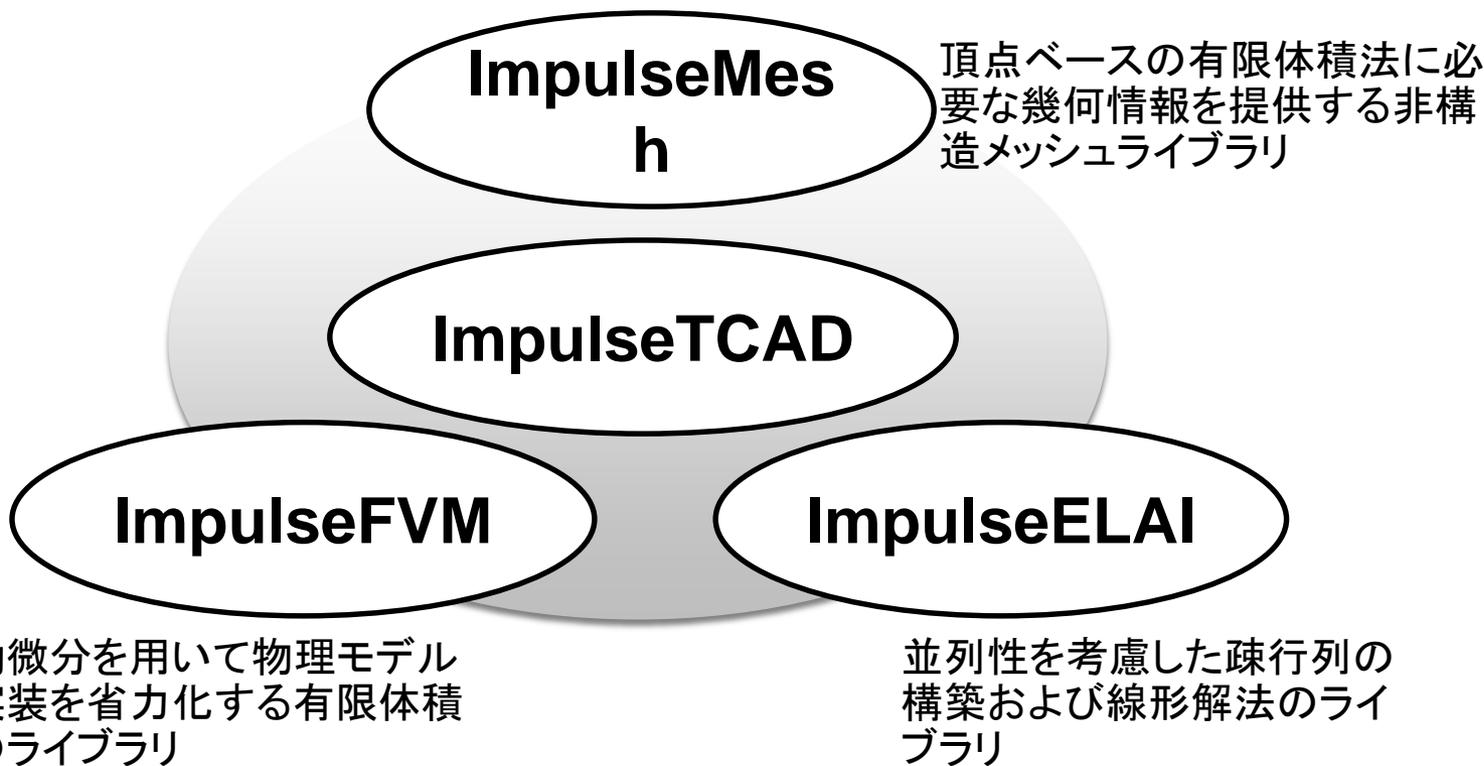


領域分割法

## これらを備えたTCADを開発

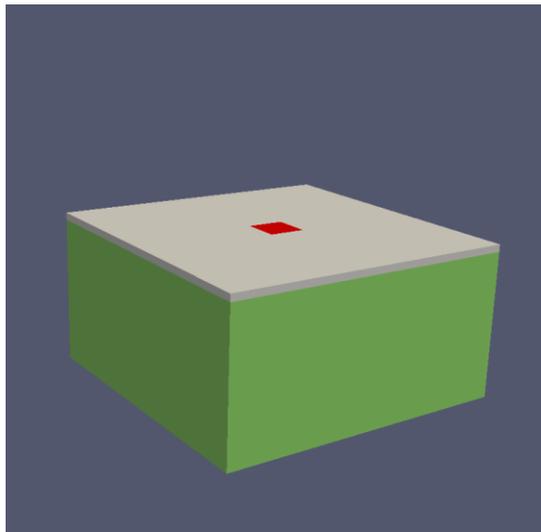
# ImpulseTCAD

目標：物理モデルを容易に拡張でき、大規模解析が可能な半導体シミュレータの開発

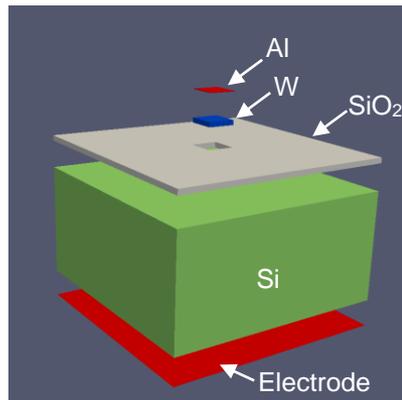


# ImpulseMesh: メッシュライブラリ

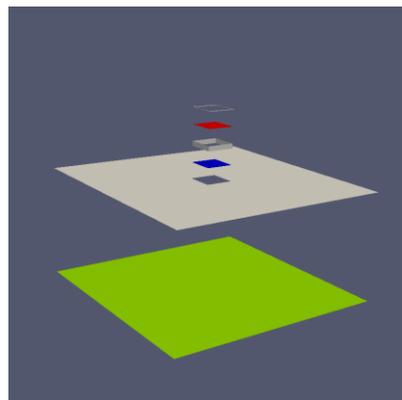
- ・ デバイスの内部表現として、標準的な VTK データフォーマットを採用
- ・ paraview などの高度な可視化工具が利用可能



一体化したメッシュとして表現されたデバイス構造



+



デバイスを材質毎に分解し、個別の VTK データセットとして管理  
(特定部位の可視化が可能になるだけでなく、物理方程式の設定も簡明化される。)

材質間の境界情報を別途、抽出し、境界面積と共に提供する  
インタフェースを構築  
(典型的な境界条件だけでなく、ヘテロ境界を記述する物理方程式にも対応)

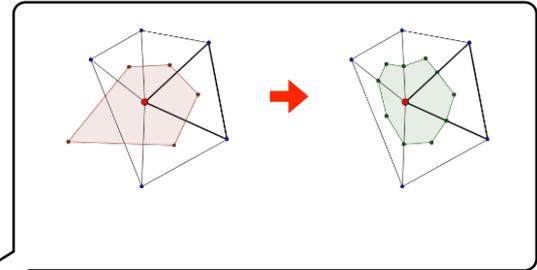
# ImpulseMesh: メッシュライブラリ

- ・ 下表の形状要素からなる非構造メッシュ
- ・ 頂点ベースの有限体積法に必要な幾何情報を計算
- ・ セル分割様式として外心分割に加えて重心分割モードを実装

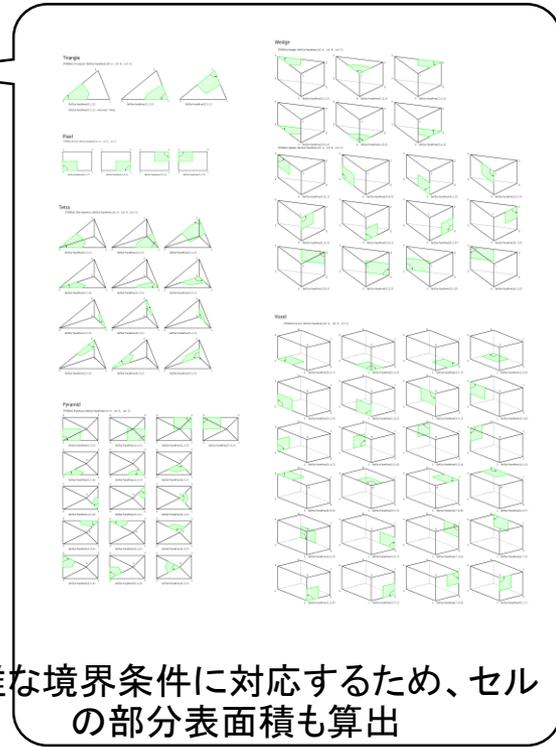
対応している形状要素

Cell Type	Circumcenter			Barycenter		
	Flux Area	Control Volume	Sub-surface	Flux Area	Control Volume	Sub-surface
Triangle	◎	◎	◎	◎	◎	◎
Pixel	◎	◎	◎	◎	◎	◎
Tetra	◎	◎	◎	◎	◎	◎
Voxel	◎	◎	◎	◎	◎	◎
Wedge	○	○	○	○	○	○
Pyramid	○	○	○	○	○	○
Quad	△	△	△	△	△	△
Hexahedron	△	△	△	△	△	△

◎: 側面/底面の四辺形は長方形のみサポート  
 △: 長方形/直方体に制限



外心分割が不適な系に対応

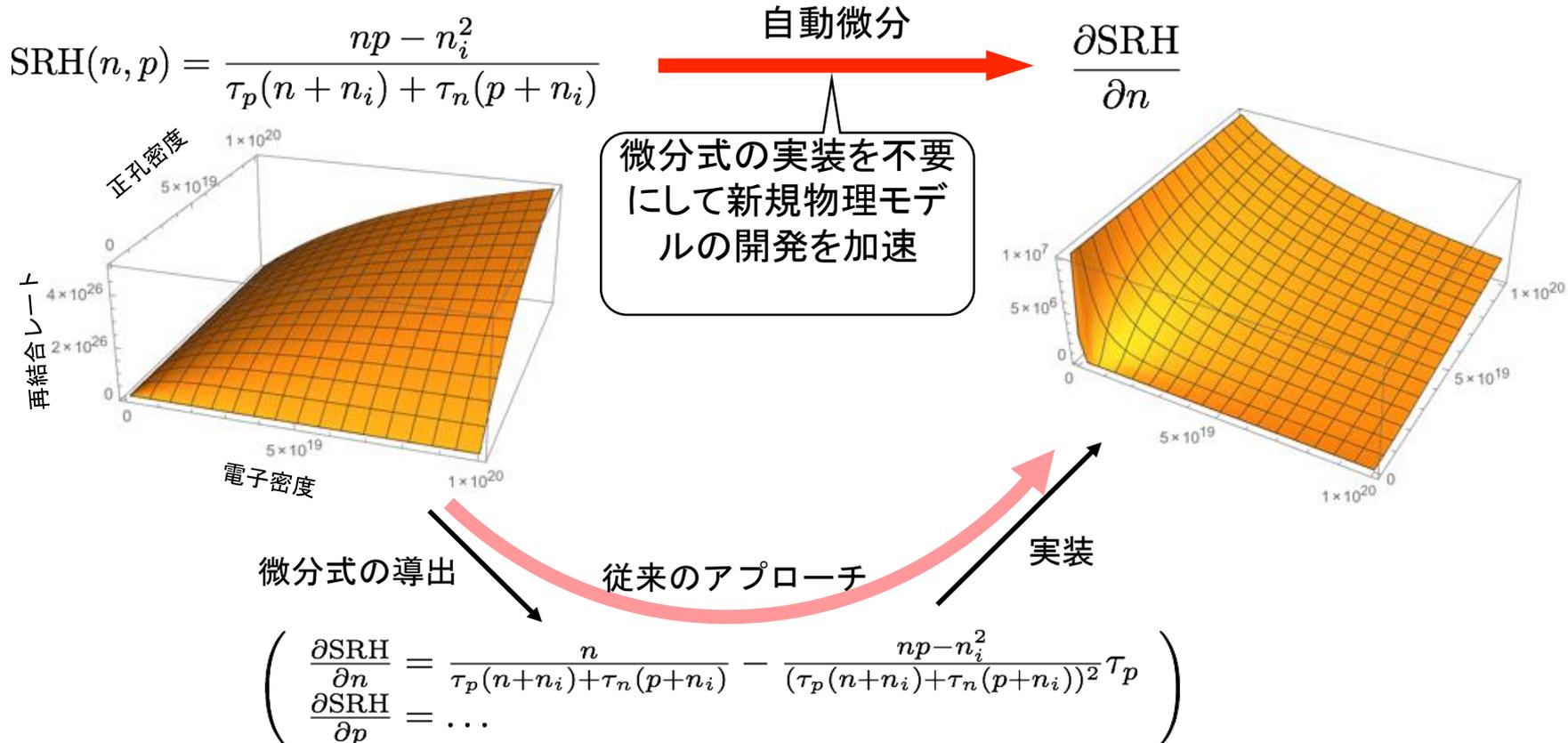


複雑な境界条件に対応するため、セルの部分表面積も算出

# ImpulseFVM: 自動微分を用いた有限体積法

- ・ デバイスシミュレーションでは大規模な連立方程式を Newton 法で解く。
- ・ Newton 法で必要になる微分式を物理方程式から自動生成

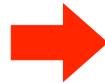
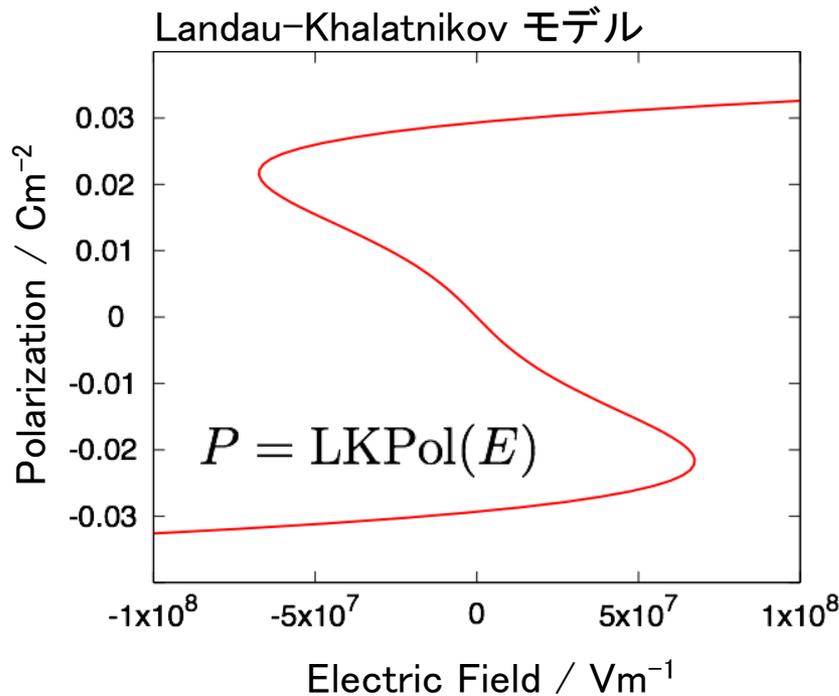
例: Shockley-Read-Hall モデル



# ImpulseFVM: 自動微分を用いた有限体積法

- ・ シンボリックな表現を用いて物理方程式を記述
- ・ 特異な物性にも短時間で対応可能

例: 強誘電体材料



## 物理方程式の記述

```

E = (Psi[1] - Psi[0]) / dx_d
P = self.LKPol(E)
Jpsi = pc.eps0 * E + P
rho = 0.0
    
```

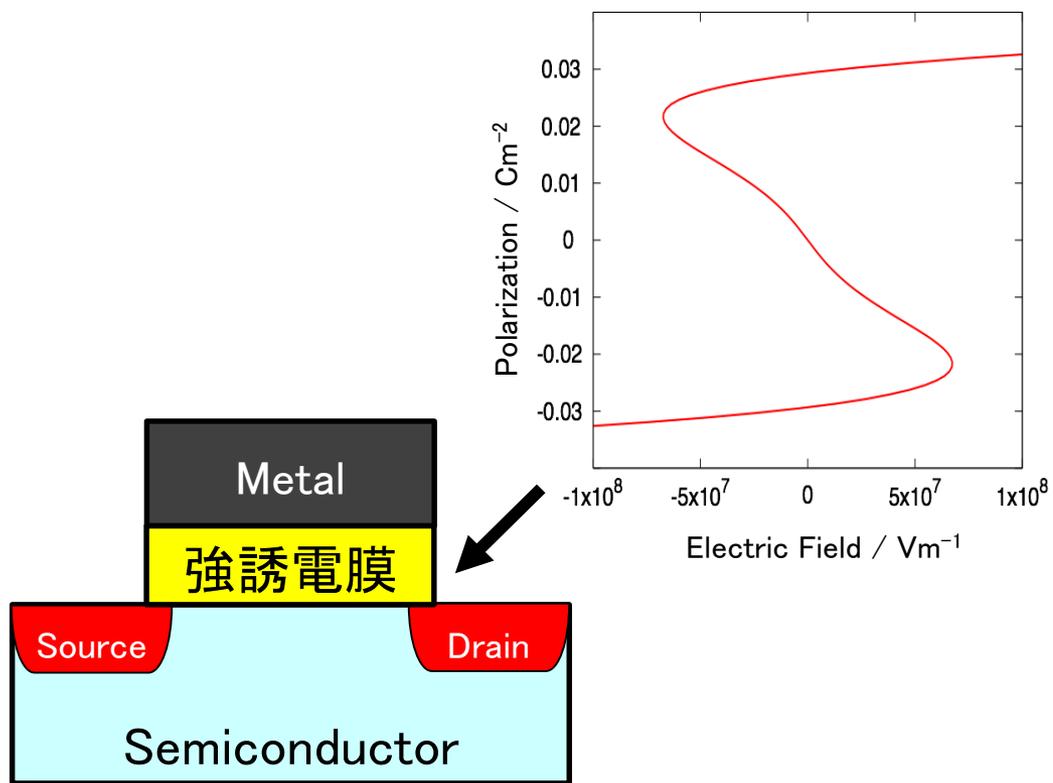
電場の計算

分極の計算

ポアソン方程式

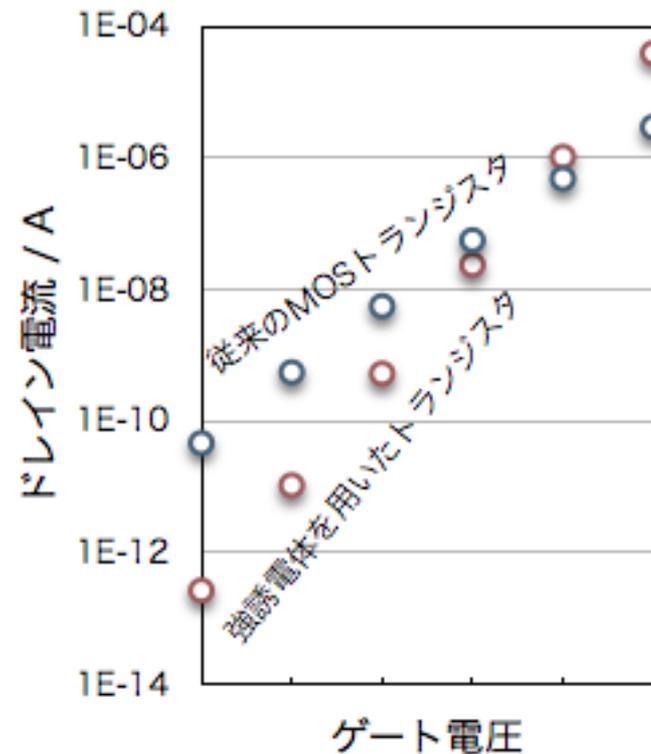
有限体積法の方程式をほぼそのまま記述することが可能

# 強誘電体を用いたトランジスタへの応用



強誘電体を用いたトランジスタ

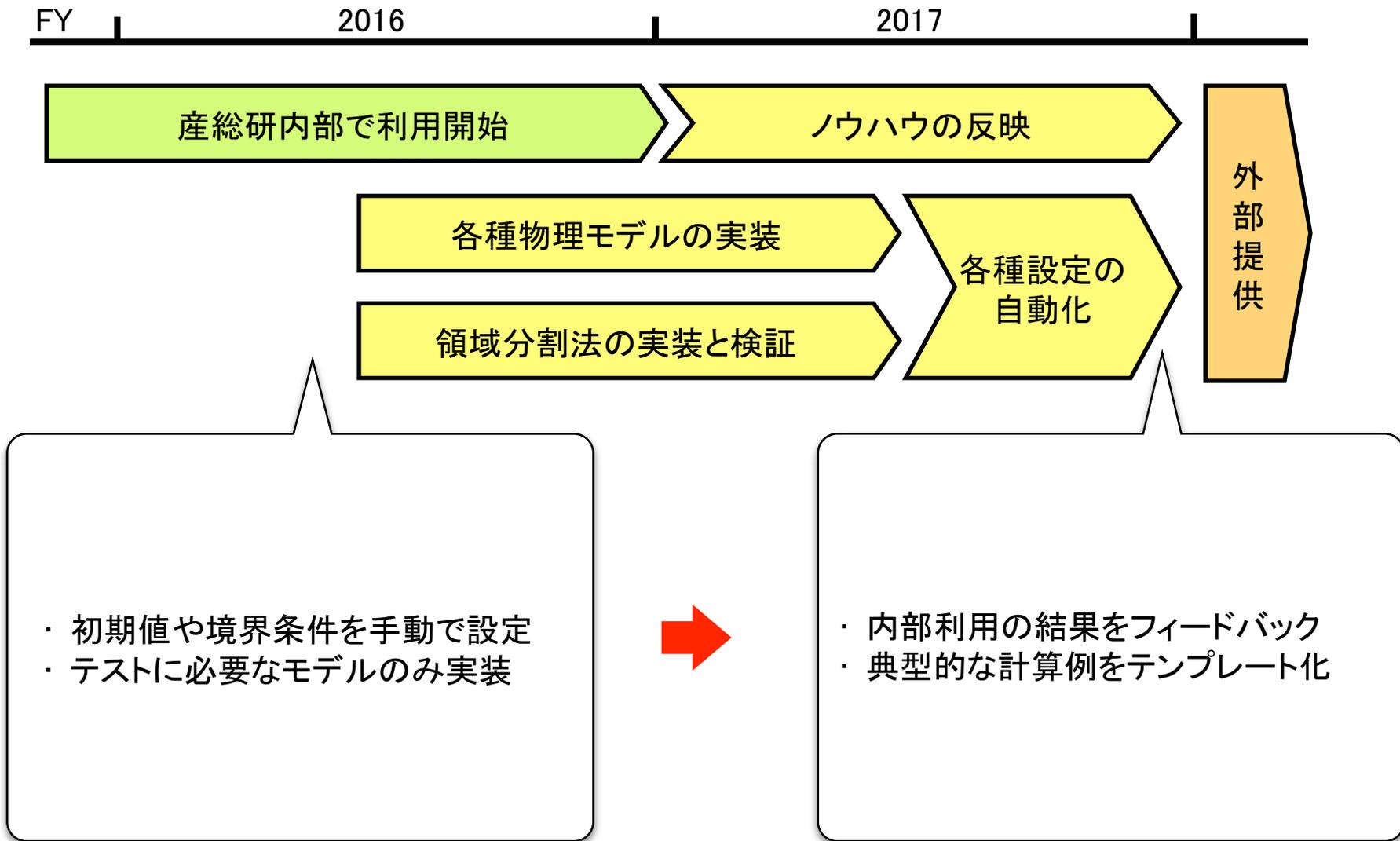
Ota et al, JJAP 2016



シミュレーション結果

強誘電膜の非線形な動作を含めた解析が可能となった

# ロードマップ



# まとめ

1. 今後のトランジスタの開発に対応できるTCADが必要
2. 新たなTCADの開発
  - 物理モデルに対応できる自動微分を搭載
  - ↳ 強誘電体トランジスタへの応用
  - 並列化を想定したソフトウェア設計
1. 今後の予定
  - 領域分割法の搭載
  - ユーザーインターフェース

共同研究や国プロなどでの提供・活用