

# 半導体開発を加速するシミュレーション技術

2008年3月更新

## 概要

半導体CMOS技術における微細化は目覚ましい進展を続け、例えば、ゲート絶縁膜部分の厚さは原子数層分にまで達しています。今後さらなる微細化や新規材料の導入が進む中でより高品質な膜を得るためには、原子レベルでの制御が求められます。このような絶縁膜材料に対して分子動力学シミュレーション計算を行うことにより、最適な熱処理条件・組成・構造などを予測し、成膜条件を決める際の指針を提供することができます。それにより、半導体開発を加速することが可能となります。

## 技術のポイント

絶縁膜材料における最適な熱処理条件・組成・構造などを予測するためには、何通りもの条件に対する計算を行う必要があります。富士通製の分子動力学ソフトウェア「Materials Explorer」<sup>(\*)1</sup> とジョブ管理ソフトウェア「Systemwalker CyberGRIP」<sup>(\*)2</sup> を連携させることにより、複数の熱処理条件や組成の組み合わせに対する大量の逐次シミュレーションを効率よく実行するとともに、結果の解析およびグラフ表示を自動的にこなすことを可能にしました(図1)。これにより、絶縁膜材料の作成に最適な条件を効率よく探ることが可能となりました。

\*1: <http://software.fujitsu.com/jp/materials-explorer/>

\*2: <http://jp.fujitsu.com/solutions/hpc/solutions/cae/cae.html>, <http://systemwalker.fujitsu.com/jp/cybergrip/>

## 適用例

ゲート絶縁膜として用いられるHfO<sub>2</sub>/SiO<sub>2</sub>積層膜中の原子拡散、拡散障壁など、ゲート絶縁膜の熱処理特性や信頼性に関する解析と予測。

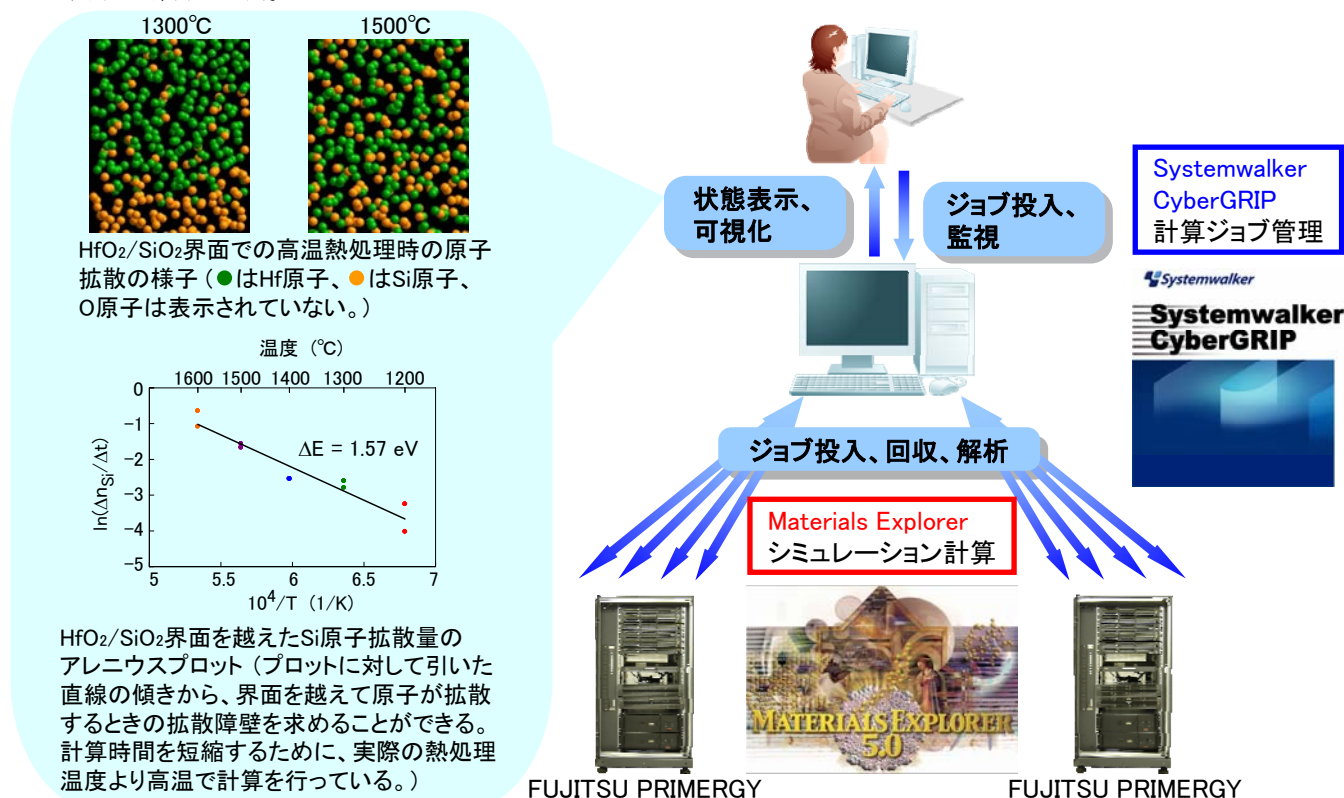


図1 Materials Explorer と Systemwalker CyberGRIP の連携によるシミュレーション計算の効率的実行と、材料特性の解析処理の自動化