

卒業論文

三次元容量計算における誤差分析

平成5年2月15日提出

指導教官
浅田邦博助教授

東京大学工学部電子工学科

学籍番号 10516

秋田純一

目次

1	序論	1
2	数値計算のための定式化	3
2.1	数値計算の手法	3
2.2	有限差分法の定式化	4
2.3	計算領域端における境界条件	5
2.4	複数の誘電体を含む部分の Poisson 方程式	6
2.5	容量の計算法	7
2.6	連立方程式の解法	8
2.6.1	係数行列の格納方法	8
2.6.2	連立方程式の解法	8
3	実際の数値計算のための種々の手法	10
3.1	Neumann 条件による鏡像効果の除去	10
3.2	格子点の生成	12
3.3	極端な形状のメッシュに対する格子点生成	13
3.4	電界強度の線形補間	13
3.5	座標の置換	14
4	数値解析の結果	16
4.1	数値計算の実際	16
4.2	Neumann 条件による鏡像の影響の除去効果	16
4.2.1	平行円筒電極間の静電容量	16
4.2.2	球間隙の静電容量	19

4.3	格子点生成の効果	22
4.4	電界強度線形補間の効果	24
4.5	座標変換の効果	25
4.6	方程式の求解方法と計算時間	25
5	結論および今後の展望	28
	参考文献	31

図一覽

2.1	2次元の場合の離散化した格子点	4
2.2	計算領域端の格子点のコントロールボリューム	5
2.3	複数の誘電体を含むコントロールボリューム	6
2.4	導体と誘電体との境界	7
3.1	マージンが小さい場合と (a)、大きい場合 (b) (図中 ○ は導体点を表す)	10
3.2	計算対象領域から端までのマージンのとりかた	11
3.3	格子点生成の様子	12
3.4	電界強度の線形補間	14
4.1	無限平行円筒間の静電容量	16
4.2	円筒断面の離散化の様子	17
4.3	等比級数メッシュの公比 r と容量計算値	18
4.4	格子点生成時の容量計算値 (a) と格子点数 (b)	20
4.5	球間隙の容量	21
4.6	等比級数メッシュの数と容量計算値	21
4.7	半無限大平行平板コンデンサ	22
4.8	メッシュ生成時の容量計算値	23
4.9	格子点生成の閾値 θ を変えた場合の容量計算値 (a) と格子点数 (b)	24
4.10	格子点生成および線形補間を行った場合の容量計算値 (a) と格子点数 (b)	24
4.11	バンド幅と計算時間の関係	26

5.1 公比 r と生成数 n 、マージン距離 x の関係 (a) と、メッシュ生成数 n に対して最大のマージンを得る r_{\max} (b)	29
---	----

表一覽

4.1 同一データに対する座標置換によるメモリ節約の例	25
---------------------------------------	----

第1章

序論

目的

近年の集積回路の微細化、高集積化に伴う集積回路製造プロセスの複雑化、高コスト化により、集積回路の動作確認のためのシミュレーションの重要性はますます増してきている。

2次元マスクパターンから写真工程、エッチング工程を経て実際にできあがる集積回路の構造はもはや2次元ではなく、厚さ方向の次元をもつ3次元構造となる。集積回路の微細化によりマスクパターン図形は縮小される一方で、厚さ方向の寸法は金属配線の耐久性等の面から比例的には縮小できない。そのため、動作シミュレーションに必要な寄生容量等のパラメータ抽出の際、厚さ方向の情報を加味しない従来の方法はもはや不適當となりつつある [1]。例えば、金属配線とシリコン基板との配線容量の抽出における平行板容量近似は、特に厚さ方向が比例縮小されないことによってむしろ、円柱間容量近似とみなす方が適当な近似となっている [2]。

2次元マスクパターンから集積回路の3次元構造を得るための方法には大規模なプロセスシミュレータ、形状シミュレータの他、簡単な図形処理による方法 [3] 等がある。これらの方法によって得られた3次元構造から容量を数値計算によって求める場合、その精度を上げるためにむやみに計算量を増やすことは計算時間の増大をまねき、得策とはいえない。

本研究では、それらの方法によって得られた3次元構造から容量成分を計算する際の方法およびその精度の妥協点、すなわち少ない数値計算量によって高い精度を

得るための方法を見い出そうとするものである。

第2章

数値計算のための定式化

2.1 数値計算の手法

集積回路の3次元構造から容量成分を計算するには、任意の形状の導体形状に対してそれらの導体間の静電容量を求める必要がある。電磁気学の手法によりそれが解析的に厳密に求まる場合もあるが、与えられた任意の形状に対する解析的手法は確立されていない。そこで、静電容量を求めることを数値計算によって行うことを考えてみる。

容量計算によく使われる数値計算方法の主なものには次のようなものがある。

- 有限差分法
- 有限要素法
- 電荷重畳法

有限差分法は導体を微小な領域に分割することによって電位分布を支配する Poisson の方程式を離散化し、連立方程式を解くことで電位分布を求めるものである。分割する領域の形状は何でもよいが、正方形、長方形がよく用いられる。

有限要素法は変分法に基をおくもので、導体を分割する領域が微小領域ごとに任意に決めることができるため有限差分法に比べて離散化にともなう誤差を小さくすることが可能である。

電荷重畳法は境界分割法ともよばれ、適切な輪郭点等を選ぶことで短い計算時間

によって正確な電位分布を求められる長所があるが、任意の形状の導体に対して適用することは難しい。

今日では有限要素法が電界解析の主流の1つになっているが、これを今回の容量計算に適用しようとする、定式化や電位分布が求まった後の処理は有限差分法に比べてやや繁雑である。また、現実の集積回路にみられる複数の誘電体が接する境界の取り扱いも困難になる。

本研究では有限差分法を用い、この方法でどの程度までの精度が得られるのかを見い出そうとすることにする。

2.2 有限差分法の定式化

容量計算を行う手順は次の通りである。

1. 導体の電位を定める
2. 有限差分法によって電位分布を求める
3. 電界強度を求め、導体表面に対して Gauss の定理を適用して表面の電荷を求める
4. 導体表面の電荷 Q と導体間の電位差 V との比が静電容量 C となる

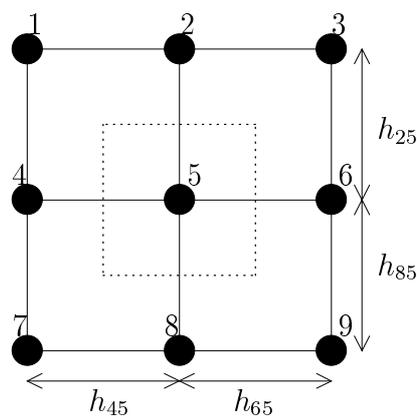


図 2.1: 2次元の場合の離散化した格子点

導体内の格子点は電位固定点である (Dirichlet 条件) ので、導体に属しない点の電位を数値計算によって求める。

図 2.1 は 2 次元の場合の離散化した格子点である。図中 5 番の格子点に着目したとき、コントロールボリューム (Control Volume) を図中の点線のようにとる。この格子点は導体に属さない点であるのでこのコントロールボリューム内には自由電荷はない。そこで、コントロールボリューム表面の電界強度を隣接格子点間の電位差を格子間の距離で割ったものと近似して、この表面について Poisson の方程式 (この場合は Laplace の方程式 $\nabla \cdot (\varepsilon \nabla \phi) = 0$ になる) に対して Gauss の定理を適用すると次の式が得られる。

$$\varepsilon_0 \frac{\phi_2 - \phi_5}{h_{25}} \cdot \frac{h_{45} + h_{65}}{2} + \varepsilon_0 \frac{\phi_4 - \phi_5}{h_{45}} \cdot \frac{h_{25} + h_{85}}{2} + \varepsilon_0 \frac{\phi_6 - \phi_5}{h_{65}} \cdot \frac{h_{25} + h_{85}}{2} + \varepsilon_0 \frac{\phi_8 - \phi_5}{h_{85}} \cdot \frac{h_{45} + h_{65}}{2} = 0 \quad (2.1)$$

同様の式を計算領域内の導体に属さない全格子点に対してたてると連立方程式が得られ、それを解くことで電位分布が求められる。

この方法によれば、格子間隔の h_{25} 等が格子間ごとに異なる場合も定式化が可能で長方形のコントロールボリュームを扱うことが可能となり、精度が必要な箇所の格子間隔を細かくとることができる。

2.3 計算領域端における境界条件

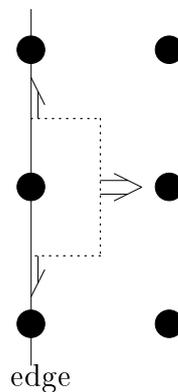


図 2.2: 計算領域端の格子点のコントロールボリューム

計算領域の端の格子点では図 2.2 のようにコントロールボリュームを領域内部分の半分のみとする。

このことはすなわち、領域外の部分は領域内と同等であるとみなすことになる。つまりこの格子点の左側に格子点があったとしても、右側の格子点とすべての条件で同等と扱うことになる。このような条件を Neumann 条件といい、端部分を対称面として鏡像対称な領域が計算領域外に存在するのと同等の効果を持つ。

計算領域を十分大きくとらないと、この鏡像の効果によって求めようとする領域内の導体間の静電容量の誤差を生じることがある。

2.4 複数の誘電体を含む部分の Poisson 方程式

実際の集積回路の構造では、異なる誘電率を持つ物質が接する境界が必ず存在する。例えば、シリコン基板 ($\epsilon_r = 11.9$) と酸化膜 ($\epsilon_r = 3.9$) などである。集積回路のパラメータ抽出のための容量計算では、もちろんこのような境界も扱えなければならない。図 2.3 のように複数の誘電体を含むコントロールボリュームにおいて、先

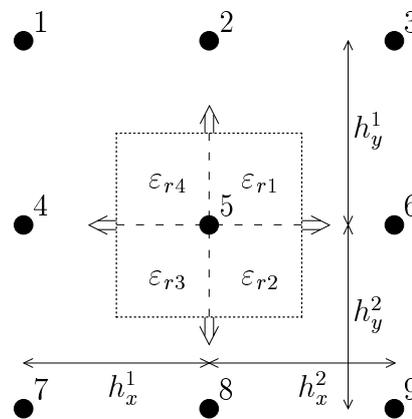


図 2.3: 複数の誘電体を含むコントロールボリューム

ほどの (2.1) と同様な離散化を行うと次のようになる。

$$\begin{aligned} & \epsilon_{r1} \frac{\phi_6 - \phi_5}{h_x^2} \cdot \frac{h_y^1}{2} + \epsilon_{r2} \frac{\phi_6 - \phi_5}{h_x^2} \cdot \frac{h_y^2}{2} + \epsilon_{r2} \frac{\phi_8 - \phi_5}{h_y^2} \cdot \frac{h_x^2}{2} \\ & + \epsilon_{r3} \frac{\phi_8 - \phi_5}{h_y^2} \cdot \frac{h_x^1}{2} + \epsilon_{r3} \frac{\phi_4 - \phi_5}{h_x^1} \cdot \frac{h_y^2}{2} + \epsilon_{r4} \frac{\phi_4 - \phi_5}{h_x^1} \cdot \frac{h_y^1}{2} \end{aligned}$$

$$+\varepsilon_{r4} \frac{\phi_2 - \phi_5}{h_y^1} \cdot \frac{h_x^1}{2} + \varepsilon_{r1} \frac{\phi_2 - \phi_5}{h_y^1} \cdot \frac{h_x^2}{2} = 0 \quad (2.2)$$

この方法は、コントロールボリューム表面上では誘電率が一定としているため、異なる誘電体の境界は必ず格子点にくるようにしなければならない。

2.5 容量の計算法

以上のような Poisson 方程式を領域内の導体に属さない全格子点に対してたて、それらを連立方程式として解くことによって、領域内の電位分布が求められる。ここから静電容量を求めるには次の手順をふむ。

まず領域内に存在する導体に属する格子点で隣あっているものどうしは同一の導体内の点とみなし、各格子点がどの導体内の点なのかを認識する。

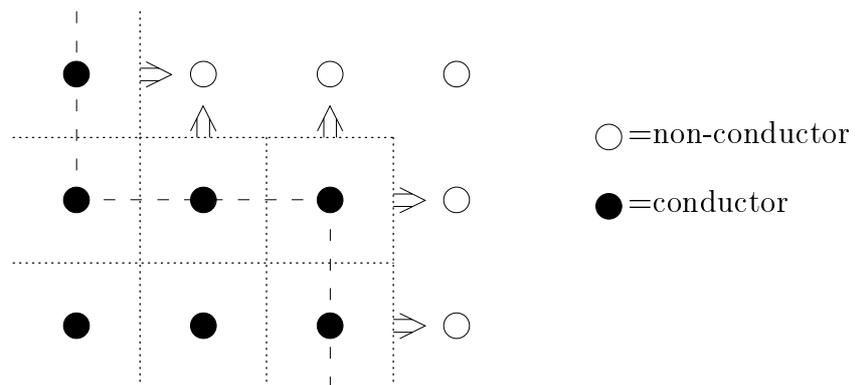


図 2.4: 導体と誘電体との境界

次に導体表面の格子点に対して、導体の外に向かうコントロールボリュームの面 S に対して次の Gauss の定理を適用する。

$$\int_S \varepsilon \mathbf{E} \cdot \mathbf{n} ds = -Q \quad (2.3)$$

まわりがすべて導体点であるような導体内部の点に対しては電荷は存在しないのでこの計算を行う必要はない。

これで求められる電荷はそのコントロールボリューム内にある電荷の総量なので、各導体を構成する格子点についてその和をとって各導体にある電荷の総量を求める。領域内の導体が 2 つの場合は、最初に与えた電位差との比が静電容量となる。

3つ以上の導体が存在する場合は1つの導体だけに1[V]の電位を与え、他の導体を0[V]にして順次求めることができる[4]。

なお、2.2~2.5の立式は2次元の場合についてであったが、電位考慮を隣接6点としてコントロールボリュームを直方体にとることによって3次元でも定式化ができる。

2.6 連立方程式の解法

電位分布を求めるには(2.2)を全格子点に対してたてることによって得られる連立方程式を解く必要がある。連立方程式は、線形代数の教えるところによって係数を行列としてもち、その逆行列を求めることによって解くことができるが、通常格子点数は数千から数万におよび、そのまま係数を行列にもつと必要な記憶装置が膨大になり(格子点数が10,000の場合、行列の要素数は $10,000 \times 10,000 = 1 \times 10^8$ になり、各要素を倍精度実数変数でもつと $8 \times 10^8 = 800$ [Mbyte]の記憶装置を必要とする)また逆行列の計算に必要な時間も膨大なものになる。そのため、効率的な係数行列の格納方法と逆行列の解法が必要となる。

2.6.1 係数行列の格納方法

Poisson方程式を離散化して得られる連立方程式の係数行列は対称行列であり、しかも非零成分が対角成分付近に集中するという特徴がある。この特徴をいかして記憶に要する記憶容量を減らすことができる[5]。

2.6.2 連立方程式の解法

連立方程式の解法には大きく分けて直接法と間接法の2つがある。一般的に直接法は高い精度が得られる反面、主に係数行列の非零要素の数で決まる一定の計算時間が必要で、また大量の主記憶容量が必要となる。反復法はその逆で、一般に係数行列の対角優位性が強いほど短時間で高精度の解が得られる。主に小規模の計算では直接法、大規模の計算では反復法が有効となる。

反復法にもいくつかの手法があるが、共役勾配(Conjugate Gradient ; CG)法およびそれを基にした方法が近年広く用いられている[6]。その中で、対称行列に対して

有効な二重共役勾配 (Bi-Conjugate Gradient ; B.C.G.) 法を主に用いる。

第3章

実際の数値計算のための種々の手法

3.1 Neumann 条件による鏡像効果の除去

2.3 で述べたように、計算領域を有限にとる有限差分法では、必ず境界における Neumann 条件による鏡像の効果が現われる。

計算しようとする形状に対して、どの程度の周辺空間(以下、マージン (margin) と呼ぶ)をとれば鏡像の効果が無視できるのかは経験則があるが [6]、いずれにしてもマージンを大きくとるほど鏡像の効果が小さくなる。

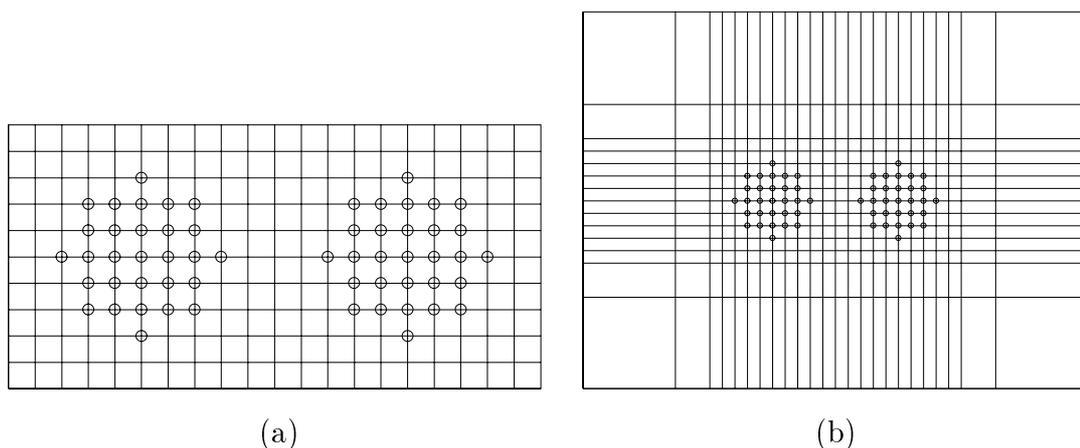


図 3.1: マージンが小さい場合と (a)、大きい場合 (b) (図中 \circ は導体点を表す)

ただし、マージンを大きくとることは計算対象とする格子点数の増大、すなわち

計算時間や計算に必要な記憶装置の量の増大をまねくので、むやみに大きくとればよいというものではない。

格子点数の増大を抑えて、十分にマージンをとるための方法としては次のようなものが考えられる。

- (a) 等間隔で端まで格子点を入れる方法
- (b) 一番端の格子点間隔を十分大きくとる方法
- (c) 計算対象の形状から計算領域の端に向かって順次格子点間隔を大きくする方法

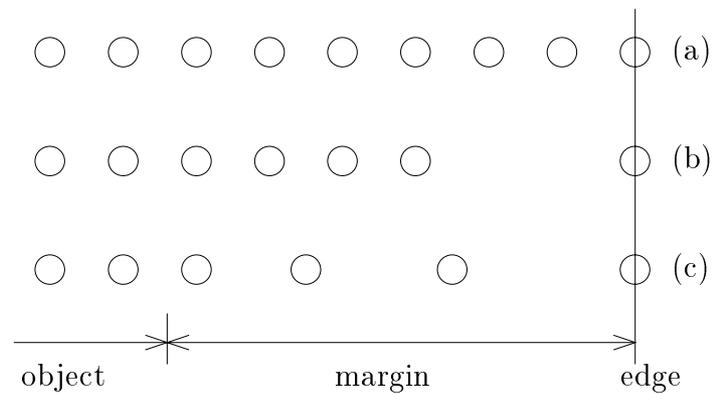


図 3.2: 計算対象領域から端までのマージンのとりかた

(a) の方法で十分にマージンをとろうとすると、計算すべき格子点の数の増加が大きく、実用的ではない。

(b) の方法は端の格子間隔のみを大きくするので、(a) よりは格子点数の増加を抑えることができるが、一つ手前の格子点間隔からの変化が大きく、その境界にまたがるコントロールボリュームに対する Gauss の定理の適用時に誤差を生じやすくなる。

(c) の方法は、隣あう格子点間隔の変化は (b) に比べて小さいので Gauss の定理適用時に生じる誤差が少なくなる。また、順次格子点間隔を大きくするので、マージンにつけくわえる格子点の増加に対して大きなマージン領域が得られる。なお、この方法で順次大きくするにも、その大きさの変化のしかたには等差級数的、等比級数的等が考えられる (本研究では主に等比級数的に変化するマージンをつけくわえ

た)。また、計算対象領域からすぐに格子点間隔が変わるマージン領域をつけくわえる他にも、計算対象領域に対していくらかの等間隔格子点を入れて (a) の方法)、それから順次大きなマージン領域をつけくわえることで、計算対象領域の端 (つまりマージン領域との境界付近) における電位分布が細かく求められることができると期待される。

3.2 格子点の生成

有限差分法では計算領域を直方体にとることができ、 x, y, z 各方向の格子間隔は格子間ごとに变えて与えることができる。電界強度が集中する箇所等は有限体積のコントロールボリュームへの離散化によって離散化誤差を生じやすいが、このような箇所の格子間隔を小さくすることで離散化誤差を抑えることができる (もちろん、むやみに格子間隔を小さくすることは計算量の大幅な増大を招くので好ましくない。)

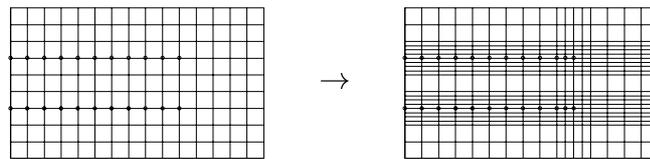


図 3.3: 格子点生成の様子

実際に、適当な場所の格子間隔を小さくするには次の手順をふむ。

1. 均等間隔に格子点をおき、電位分布を計算する。
2. その結果に基づいて電界集中箇所を見い出す。
3. その箇所に集中の度合に応じて格子間隔を小さくする。
4. 新しい格子で再度電位分布を計算する。
5. その電位分布から容量成分を計算する。

電界集中箇所の判断の基準にはいろいろなものが考えられるが、本研究では主に電界強度の位置変化率 (すなわち電位の 2 階微分) を基準として用いている。これ

は、例えば平板の端部分のような電界集中箇所では電界強度の位置変化率が大きく、かつこのような箇所に格子点を生成するのが妥当であろうと考えられるからである。

なお、このような格子点の生成は必ず計算量の増大を招くので、電界集中箇所のある形状に対して用い、例えば球状電極のように電極表面に比較的均等に電界が分布する形状に対しては計算量の増加に比べてあまり精度の向上は期待できないので用いるのは避けるべきである。

3.3 極端な形状のメッシュに対する格子点生成

3.1 や 3.2 の操作を行うことによって格子間隔が変化し、場合によっては非常に細長いメッシュができてしまうことがある。

このような形状のメッシュのところにかかるコントロールボリュームに対する Gauss の定理の適用は、面積分を電界強度にコントロールボリュームの面積をかけることで近似しているので積分誤差（桁落ちも含む）を生じる可能性がある。

どの程度まで細長くなると誤差が大きくなるのかについては諸説があるが、経験的には、メッシュの一辺の長さの比が $1 : 1000$ を越えると誤差が急激に大きくなるので、そこには格子点を生成すべきであると言われている。

3.4 電界強度の線形補間

(2.2) の積分では、コントロールボリュームの一面の電界強度を、その中心におけるもので一定であると近似している。

電界集中箇所に対しては前述のように種々の要因で誤差を生じやすいが、その対策として電界強度の線形補間を行うことを考える。

コントロールボリュームの一面を 2 つ (3 次元の場合は 4 つ) に分割し、それぞれの中心における電界強度を、となりあう格子間の電界を用いてそれぞれの距離で線形補間する。

この方法は、基本的に電位計算時の計算量が増加しない。すなわち計算時間の増加はきわめて小さい。この方法は、特に電界が集中しやすい導体のとがった形状の部分等に対して有効であると考えられる。

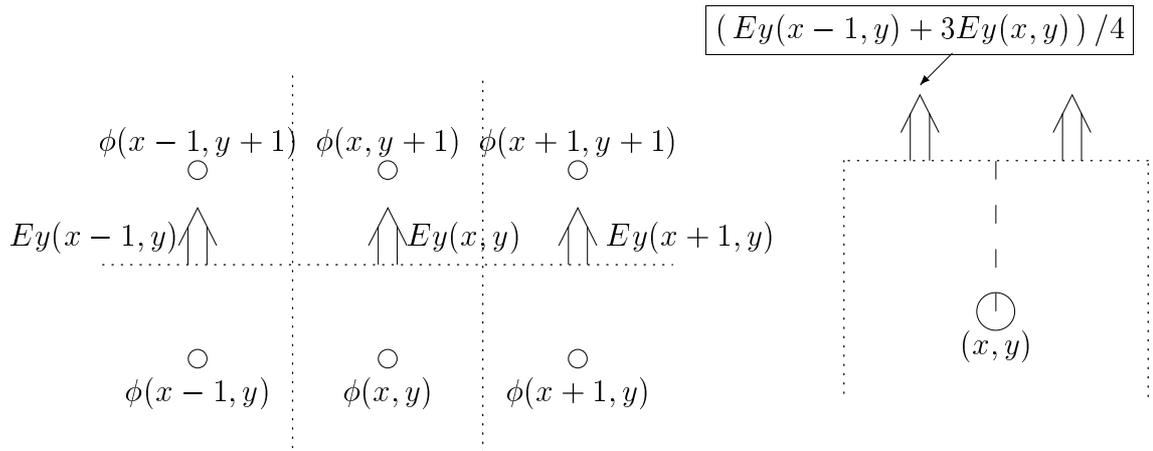


図 3.4: 電界強度の線形補間

3.5 座標の置換

Poisson 方程式を離散化して連立方程式として解くときの係数行列は、2.6.1 で述べたように対称になり、しかも対角部分に非零成分が集中する。

計算対象領域は 3 次元でとるが、その格子点には 1 次元の通し番号をつけて行列に格納する。 x, y, z 方向の格子点数をそれぞれ L, M, N としたとき、この格子系の座標 (x, y, z) の格子点の通し番号 c は

$$c = x + L \cdot (y + M \cdot z) \quad (3.1)$$

となる。Poisson 方程式の離散化の際には着目格子点 (x, y, z) の隣接 6 点に関係するが、それぞれの通し番号は次のようになる。

$$\begin{aligned} & x + L \cdot (y + M \cdot z), \\ & (x - 1) + L \cdot (y + M \cdot z), \quad (x + 1) + L \cdot (y + M \cdot z), \\ & x + L \cdot ((y - 1) + M \cdot z), \quad x + L \cdot ((y + 1) + M \cdot z), \\ & x + L \cdot (y + M \cdot (z - 1)), \quad x + L \cdot (y + M \cdot (z + 1)) \end{aligned} \quad (3.2)$$

着目格子点を基準としたとき、それぞれの通し番号は

$$-L \cdot M, \quad -L, \quad -1, \quad +1, \quad +L, \quad +L \cdot M \quad (3.3)$$

第4章

数値解析の結果

4.1 数値計算の実際

2, 3章の方法によって実際にいくつかの形状に対して数値計算を行った。計算はあらかじめ解析的に静電容量の求められる形状に対して行い、計算された容量の値と解析解との比較によって数値計算の誤差を見積もった。

4.2 Neumann条件による鏡像の影響の除去効果

まず、Neumann条件による、計算領域端における鏡像の効果の静電容量への影響について計算を行った。この効果のみをみるため、導体形状には著しい電界集中箇所のない平行円筒電極間、および双球間隙を用いた。

4.2.1 平行円筒電極間の静電容量

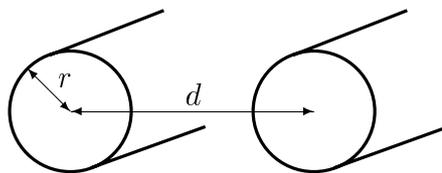


図 4.1: 無限平行円筒間の静電容量

図 4.1 の無限長平行円筒間の単位長さあたりの容量は等角写像法によって解析的に求められ、次の式で与えられる。

$$C = \frac{2\pi\epsilon_0}{\cosh^{-1}[(d^2 - 2r^2) / 2r^2]} \quad (4.1)$$

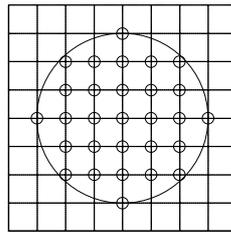


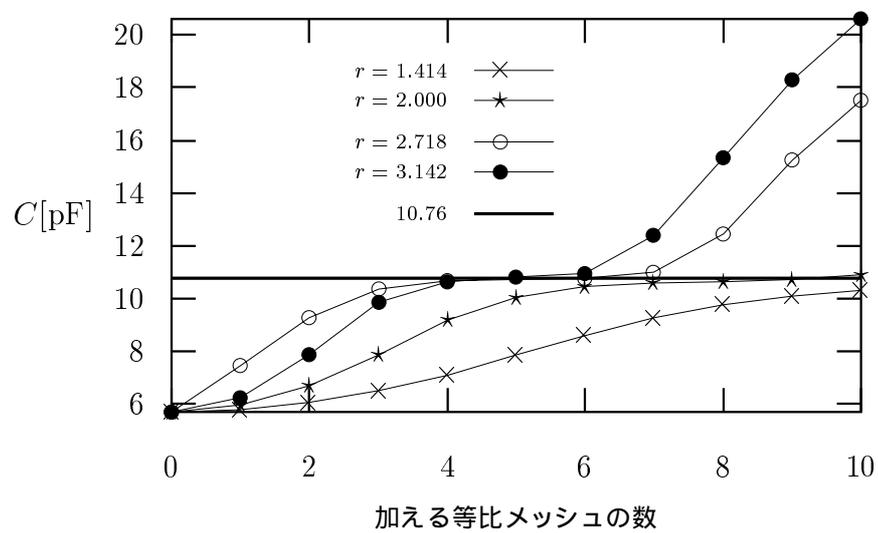
図 4.2: 円筒断面の離散化の様子

この形状で $r = 3 [\mu\text{m}]$, $d = 40 [\mu\text{m}]$ とした。容量の解析解は $10.76 [\text{pF}]$ である。

まず、周辺に等比級数的に幅の広がるメッシュ(以下、等比級数メッシュとよぶ)を生成して計算した結果を図 4.3 に示す。等比級数メッシュを多く生成するほど容量計算値が真の値に近づく様子が見られる。なお、最も誤差の小さい 6 個のメッシュを加えたときの精度は 0.2% 程度 ($r = 2.718$ のとき) であった。この誤差は離散化によるものと考えられる。また、他に次のような様子が見られる。

- あまり多くの等比級数メッシュを生成すると容量計算値が急激に大きくなることがある
- 等比級数メッシュの生成数に対する容量計算値の精度の度合は r によって異なり、 r が小さいとその度合が低く、また逆にあまり r が大きいと精度の改善が早いが見る範囲も狭い

この理由としては、あまり多くの等比級数メッシュを入れると端部分でのメッシュの形状が非常に細長くなり、その部分のコントロールボリュームでの離散化誤差が顕著になってくることが考えられる。なお、容量計算値が急激に増加し始める直前の生成メッシュ数 n は以下の通りである。

図 4.3: 等比級数メッシュの公比 r と容量計算値

r	n	r^n	r^{n+1}
1.414	–	–	$(1.414^{10} = 32)$
2.000	9	512	1024
2.718	6	403.4	1096.6
3.142	6	961.4	3020.3

このように、メッシュの縦横比が 1:1000 を越えると離散化誤差が大きくなり始める傾向がある。つまり、一般的に言われている基準 (3.3 参照) を実証した形となった。なお、このように端のメッシュが細長くなった場合に縦横比が一定値以上になったらそこに格子点を生成してメッシュの形が極端に細長くならないようにした場合の容量計算値と、それに要する計算量 (対象格子点数で表す) を図 4.4 に示す。メッシュの縦横比を小さい値に抑えるほど (格子点生成の基準値を小さくとるほど) 容量計算値は真の値に近づく。特に基準値を 300 以下にとった場合は 8 個の等比級数メッシュを入れても真の値からの誤差は 1.02% に収まっている。ただし、それに伴い計算量は急激に増大するので、あまり多くの等比級数メッシュを入れることは無意味であろう。

なお、等比級数メッシュを入れる前に数個の均等メッシュを入れた結果は、均等メッシュを 1 つ入れるごとに約 0.3% 程度の改善がみられた。

4.2.2 球間隙の静電容量

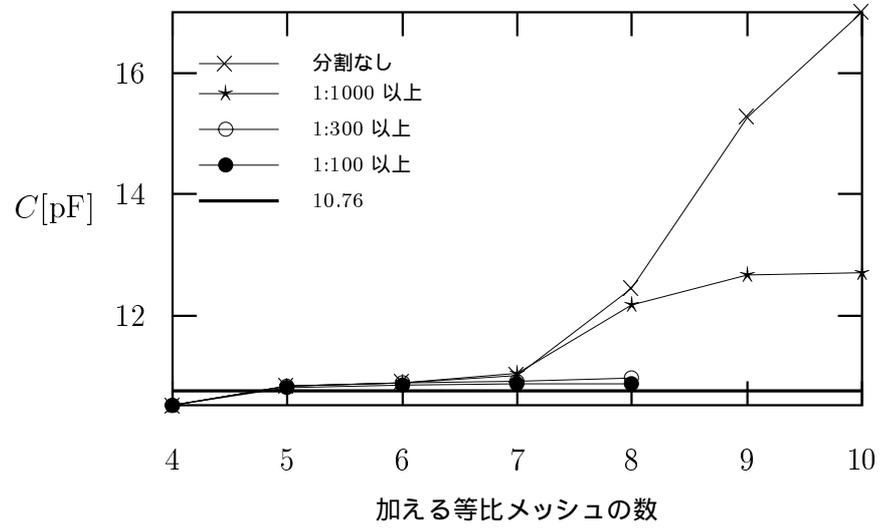
図 4.5 のような球間隙の容量は座標変換法により解析的に求められ、次の式で与えられる [7]。

$$C = \sqrt{2} c \pi \varepsilon_0 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2n+1}{2 \sinh(n+1/2) \eta_0} \int_{-1}^{+1} \frac{P_n(\mu) d\mu}{\sqrt{\cosh \eta_0 - \mu}} \quad (4.2)$$

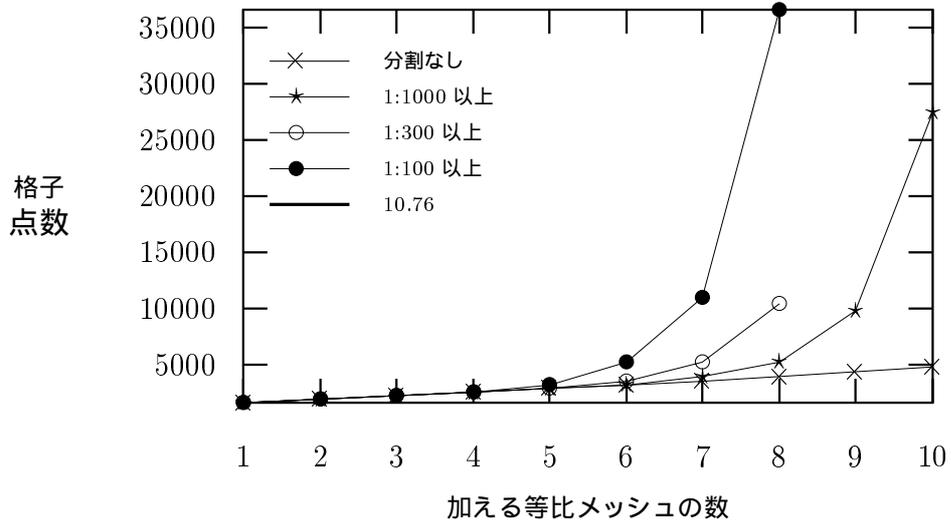
ただし、 $\eta_0 = \cosh^{-1}(d/r)$, $c = r \sinh \eta_0$, $P_n(x)$ は Legendre 多項式である。

$r = 2 [\mu\text{m}]$, $d = 10 [\mu\text{m}]$ として (4.2) の値を数値積分および有限級数和によって求めた。積分を区間分割数 100 の Simpson 法で求め級数和を求めたところ、第 6 項までの和で有効桁数 7 桁で収束し、その値は 0.1218 [fF] であった。

図 4.6 はこの形状を離散化し、等比級数メッシュを加える個数を変化させたときの容量計算値の精度の変化である。上の方の 3 本の平行線は、中央が真の値、上下はそれぞれ $\pm 0.5\%$ の範囲である。このような形状では電界の集中が比較的少ないの



(a)



(b)

図 4.4: 格子点生成時の容量計算値 (a) と格子点数 (b)

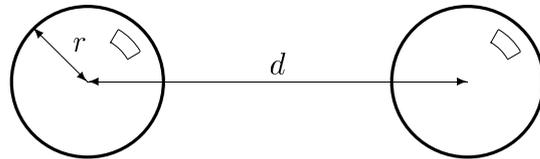


図 4.5: 球間隙の容量

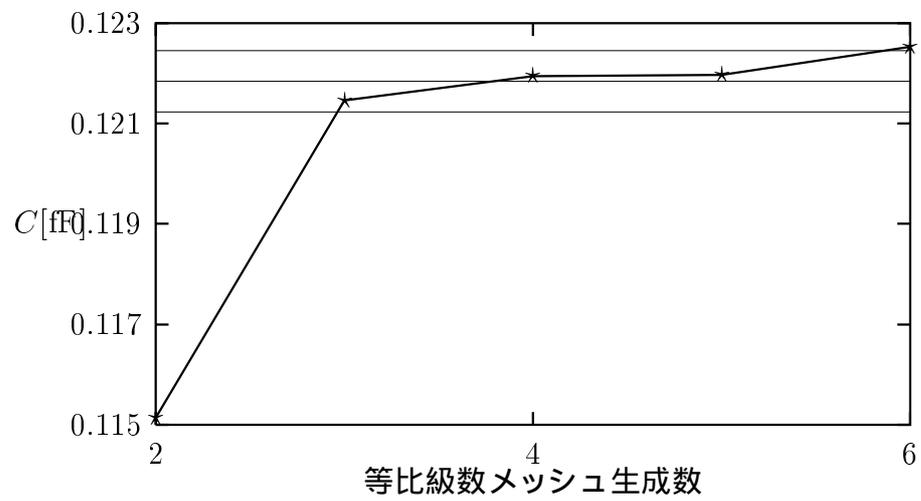


図 4.6: 等比級数メッシュの数と容量計算値

で、電界集中箇所に対する格子点生成や電界強度の線形補間を行わなくても等比級数メッシュによる鏡像効果の低減だけで0.5%以内の精度で容量計算が可能であることが示された。

4.3 格子点生成の効果

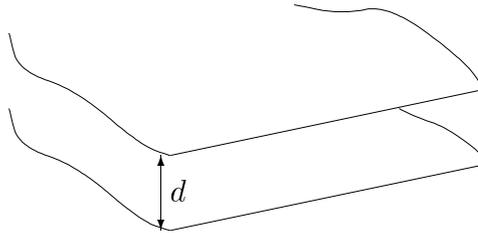


図 4.7: 半無限大平行平板コンデンサ

次に図 4.7 のような半無限大平行平板コンデンサの容量計算を行う。よく知られているようにこのような平行平板コンデンサの容量はいわゆる端効果によって無限平行平板コンデンサの容量 ($C = \varepsilon_0 S/d$) よりも大きくなる。このコンデンサの端から極板内に l の部分の容量は等角写像法によって求められ、次の式で与えられる [8]。

$$C = \varepsilon_0(v_2 - v_1) \quad (4.3)$$

ただし、 $v = v_1, v_2$ は次の方程式の解である。

$$-dv + \frac{d}{2\pi}(1 - e^{-2\pi v}) = -l \quad (4.4)$$

$d = 2 [\mu\text{m}]$, $l = 10 [\mu\text{m}]$ としたときの単位長さあたりの容量の解析値は、(4.4) を Newton 法で解き、それを元に求めたところ $C = 50.73 [\text{pF}]$ となった。

計算領域の端から $2 [\mu\text{m}]$ の間隔で $10 [\mu\text{m}]$ の平板をおき、その容量を計算した。実際にはこの状態と図 4.7 の場合とは異なる (計算領域端での条件が図 4.7 の場合は無限に続く平板内の一部であるのに対し、離散化後は鏡像面となる) が、ほぼ同等であるとみなして計算結果の検討を行う。

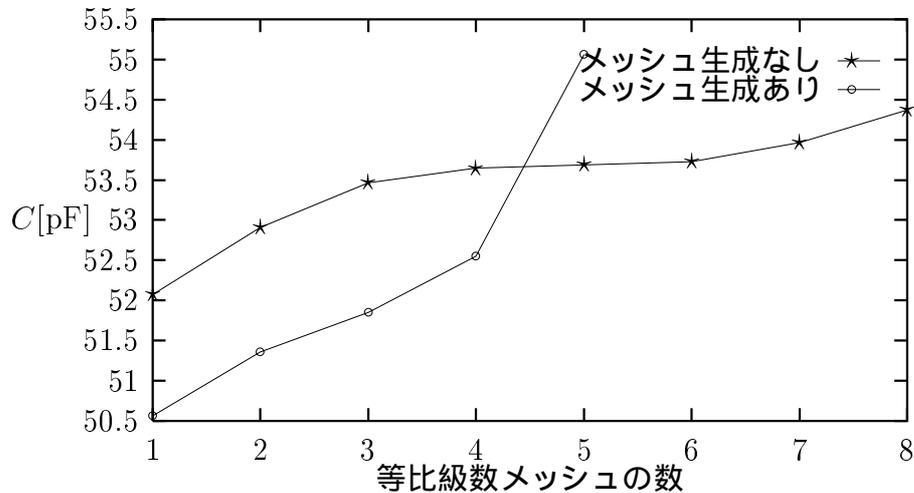


図 4.8: メッシュ生成時の容量計算値

3.2 によって電界強度が一定値以上に集中している箇所には格子点を生成して容量計算を行った結果が図 4.8 である。

格子点生成を行わないときよりもおおむね真の値に近いが、5 個の等比級数メッシュをいれたときの容量計算値が急激に増加している。このときの領域内のメッシュの縦横比の最大値は 900 程度になっていた。すなわち、電界集中箇所への格子点の生成によって極端に細長いメッシュができてしまったことによって、4.2 と同様の結果が出たものと考えられる。極端な形のメッシュに対してさらに格子点の生成を行うとさらに計算量の増加を招くので、電界集中箇所の判断基準を低くしてみた。その結果が図 4.9 である (θ は相対的な格子点生成時の電界強度の基準値で、 $\theta = 100$ は図 4.8 の場合である)。

なお、 $\theta = 200$ の場合のメッシュの最大縦横比は 491.4 (等比級数メッシュ数 $n = 4$)、742 ($n = 5$) であった。 n が小さい範囲では θ を小さくとる方が真の値に近いが、計算量の増加が急激である。格子点生成を行わない場合に比べて $\theta = 200$ の場合で 3 倍以上、 $\theta = 100$ では 10 倍近くにもなる。それに伴う精度の改善は 5.1% (格子点非生成時) から 2.4% ($\theta = 200$) である。

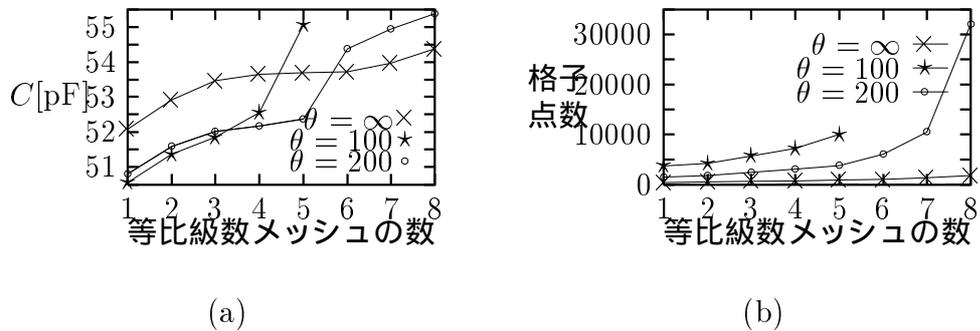


図 4.9: 格子点生成の閾値 θ を変えた場合の容量計算値 (a) と格子点数 (b)

4.4 電界強度線形補間の効果

3.4 で述べた電界強度の線形補間の方法によって 4.3 と同様の形状に対して計算を行ってみた。

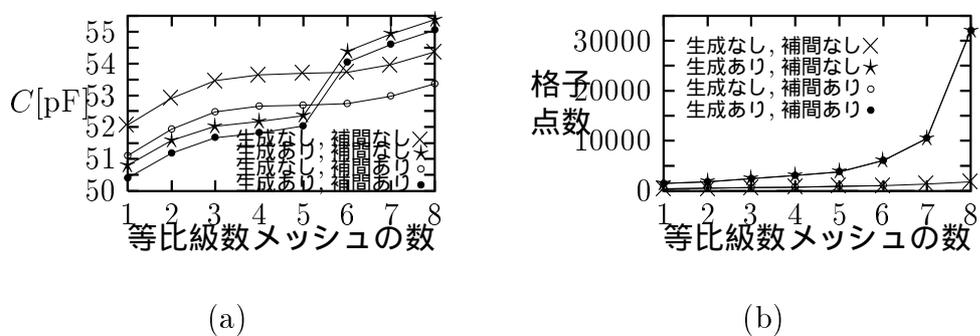


図 4.10: 格子点生成および線形補間を行った場合の容量計算値 (a) と格子点数 (b)

格子点生成を行わなくても線形補間だけで 3.5%の精度が得られ、格子点生成との併用で 2.0%の精度が得られている。

計算時間のほとんどは連立方程式の求解であるので格子点生成を行わなければ計算時間の増加はほとんどなく、線形補間のみによって精度の向上が得られることが示された。

L	M	N	必要メモリ	計算時間
y	x	z	2252K	29.3
x	z	y	1094K	17.8
z	x	y	1751K	24.3

表 4.1: 同一データに対する座標置換によるメモリ節約の例

4.5 座標変換の効果

3.5 で述べたように x, y, z 方向の格子点数から座標の置換を行うことによってバンド幅を狭くすることができる。

バンド幅が狭くなることは、4.6 で述べるように計算時間の短縮につながるだけでなく、格納に必要な記憶装置も少なく済む利点がある。

ただしこの方法によっては係数行列以外に必要な記憶領域の大きさは変わらず、しかも最初から L, M に小さい方の 2 つが入っている場合は置換できない。

表 4.1 はいろいろな置換を行った例である。 L, M, N の大きさによって同一形状でも必要メモリ、計算時間が大幅に変化する。

L, M, N の順列 $3! = 6$ 通りの中でこのような L, M を最小にする置換を行うことで必要メモリを少なくすることができる。このような処理はデータ入力時の前処理の一種であるので、行うべきであろう。

4.6 方程式の求解方法と計算時間

2.6.2 で述べたように連立方程式の求解方法にはいくつかの方法があるが [9]、ここでは次の 6 種類の方法で同一方程式を解き、求解方法ごとの計算量と計算時間との関係を見た。

- Gauss の消去法
- Gauss の緩和法
- LU 分解法

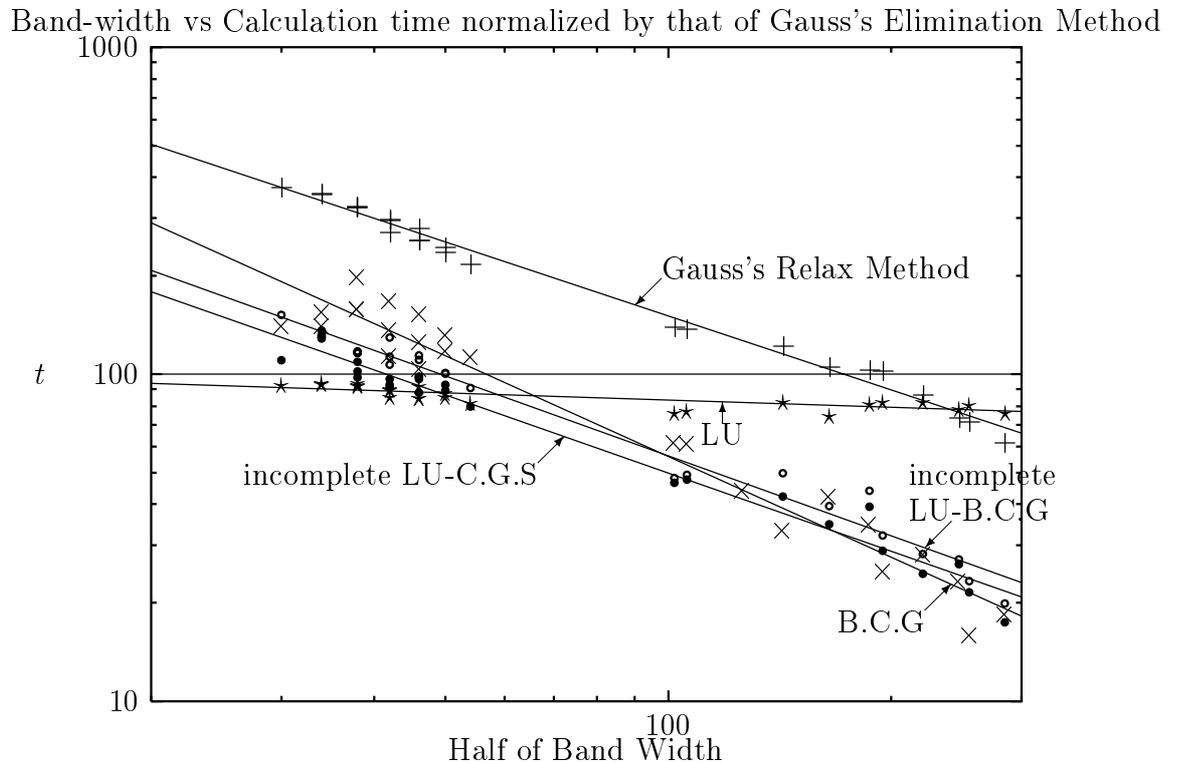


図 4.11: バンド幅と計算時間の関係

- B.C.G.(Bi-Conjugate Gradient) 法
- 不完全 LU 分解前処理つき B.C.G. 法
- 不完全 LU 分解前処理つき C.G.S. 法

このうち、不完全 LU 分解 B.C.G.(Incomplete LU decomposition and Conjugate Gradient ; ILUBCG) 法は非対称行列向きの方法であるが、あえて対称行列となる Poisson 方程式の求解にも用いた。

3.5 で求めたバンド幅をパラメータとし、バンド幅と計算時間 (Gauss の消去法を基準とした相対値) を示した。結果を図 4.11 に示す。

これらの中で不完全 LU 分解前処理つき B.C.G./C.G.S 法が特にバンド幅が狭い範囲 (このような範囲では計算時間そのものが短い) を除いては全般的に比較的高速に解が求まっている。これに対し、B.C.G. 法は、バンド幅が狭いところでは Gauss

の消去法よりも時間がかかる場合もあるが、バンド幅の増加に対する計算時間の短縮は最も効率がよく、特にバンド幅が広くなると有効であることがわかる。

第5章

結論および今後の展望

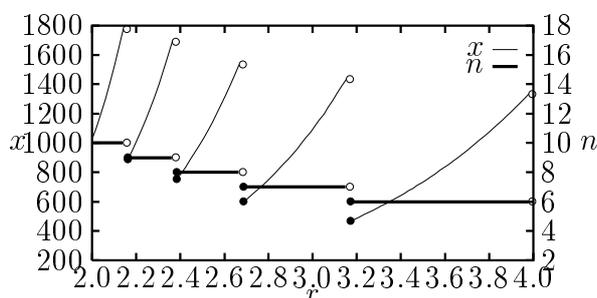
本研究を通して以下の結論が得られた。

1. Neumann 条件による鏡像の効果を除去するには等比級数メッシュの生成が有効である。ただし、あまり多く生成すると縦横比の大きすぎるメッシュができてかえって精度が落ちる。なお、メッシュ幅の公比は小さすぎると格子点追加に対する等比級数メッシュ生成の効果が少なく、大きすぎるとメッシュの縦横比の関係から精度が落ちやすい。

その関係を定量的に考えると次のようになる。公比を r とすると、メッシュの縦横比が $1 : 1000$ を越えないメッシュ生成数の最大 n は $r^{n-1} < 1000$ から $n = [1 + \log_r 1000]$ となる (ただし $[x]$ は Gauss の記号で、 x を越えない最大の整数を表す)。このときのマージンの距離 x は $\sum r^{k-1} = (r^n - 1)/(r - 1)$ となり、必然的に r 、 n が共に大きいほど大きくとれる。公比 r を変化した場合の、縦横比が $1 : 1000$ を越えない生成数 n とそれに対するマージン距離 x との関係を図 5.1(a) に示す。

r を大きくするほど n が小さく抑えられるため、 x が頭うちになる。生成するメッシュ数 n を決めたととき、最大のマージンが得られる r は Gauss の記号の中が整数になるときの値で、 $1 + \log_{r_{\max}} 1000 = n$ から $r_{\max} = 10^{3/(n-1)}$ となって図 5.1(b) のようになる。

メッシュ生成数は計算量から制限されるであろうから、許される n に対して図 5.1(b) のような公比 r をとることによって効率的なマージンが得られる。



(a)

n	$r_{\max} = 10^{3/(n-1)}$	x
4	10.0000	1111.00
5	5.62341	1216.07
6	3.98107	1335.11
7	3.16228	1462.01
8	2.68270	1593.69

(b)

図 5.1: 公比 r と生成数 n 、マージン距離 x の関係 (a) と、メッシュ生成数 n に対して最大のマージンを得る r_{\max} (b)

2. 導体のとがった形状の部分のように電界の集中がおこる箇所には格子点生成および電界強度の線形補間を行うことによって精度の改善ができる。双方の併用が有効であるが、格子点生成法は場合によっては膨大な計算量の増大を招くので、計算時間の短縮を優先する場合は電界強度の線形補間のみでもある程度の精度の改善はできる。
3. 計算の前処理として座標成分のいれかえにより、係数行列のバンド幅が狭くなり必要なメモリを少なくできる。また、計算時間の短縮も実現できる。
4. 係数行列は対称かつ対角優位性が強いという特徴があるので、特にバンド幅が広いときには C.G. 法系の解法が高速である。

本研究を通して、3次元構造の容量計算を行う際の計算量および精度の改善のための指針が得られた。これは2次元マスクパターンから種々のプロセスパラメータに関係して得られる3次元デバイス構造に対して配線容量等の容量成分を抽出する方法への足がかりとなるであろう。

謝辞

本研究を行なうにあたり、熱心に指導してくださった浅田邦博助教授に心から深く感謝いたします。

また、多くの助力をいただいた大学院生の皆様や日産自動車の岩崎靖和氏をはじめ、浅田研究室の皆様に感謝いたします。

参考文献

- [1] A.E. Ruehli and P.A. Brennan. "Accurate Metallization Capacitances for Integrated Circuits and Packages". *IEEE J.SSC.*, Vol. **SC-8**, No. 5, pp. 289–290, August 1973.
- [2] 原央 (編). 「MOS 集積回路の基礎」. 超 LSI 入門シリーズ. 近代科学社, 1992.
- [3] 宝珠山治. 「微細集積回路のためのレイアウト三次元表現手法」. 卒業論文, 東京大学, 1991.
- [4] 富士総合研究所 (編). 「半導体素子設計シミュレータ」. 丸善, 1991.
- [5] 佐々木靖彦. 「有限要素法による MOS 電界効果トランジスタの高電界数値解析」. 修士論文, 東京大学, 1991.
- [6] 谷口研二 (編). 「最新 / 半導体プロセス・デバイスシミュレーション技術」. リアライズ社, 1990.
- [7] 清野武. 「電磁気学 I」. 現代電気工学講座. オーム社, 1962.
- [8] 内藤喜之. 「電気数学 I」. 電気・電子工学基礎講座. 森北出版, 1976.
- [9] 壇良. 「プロセス・デバイス・シミュレーション技術」. 集積回路プロセス技術シリーズ. 産業図書, 1988.