Advance/TCADの光ー半導体連成解析機能

萩原 敦* 並木 武文* 原田 昌紀*

TCAD simulation of optical semiconductor device

Atsushi Hagiwara^{*}, Takefumi Namiki^{*} and Masanori Harada^{*}

電磁波解析ソフトウェア Advance/ParallelWave および LSI デバイス設計 CAD システム Advance/TCAD を使用して、光ー半導体連成解析を行った。計算事例として、太陽電池および垂直色分離センサーを取り上げる。

Key word:太陽電池、光センサー、電磁波解析、FDTD、光電変換、TCAD、デバイスシミュレーション

1. はじめに

近年、高効率太陽電池や高性能光センサーの開 発が盛んに行われており、設計段階で動作性能を 予測するためのシミュレーション技術に高い関 心が集まっている。太陽電池や光センサーの性能 評価では、光吸収によって励起されたキャリアに よる電流を正確に求める必要があり、電磁波シミ ュレーションと半導体デバイスシミュレーショ ンの連成が重要となる。

今回は、当社が開発した電磁波解析ソフトウェ ア Advance/ParallelWave、および LSI デバイス設計 CAD システム Advance/TCAD を使用して、太陽電 池および垂直色分離センサー[1]の光-半導体連成 解析を行った(図 1)。



電磁波解析により半導体内部の光吸収分布を算出する [ParallelWave]
 光吸収分布をキャリア分布に光電変換する [TCAD]
 デバイスシミュレーションにより発生する光電流を算出する [TCAD]

※キャリア分布=電子/正孔対発生濃度分布

図 1 Advance/ParallelWave と Advance/TCADの連成

*アドバンスソフト株式会社 第1事業部

1st Computational Science and Engineering Group, AdvanceSoft Corporation

2. 電磁波解析機能

電磁波解析とは、電磁波の支配方程式である Maxwell 方程式をコンピュータシミュレーション によって解き、電磁波の挙動とそれを起源とする 物理諸量を算出することである。当社が開発した Advance/ParallelWave では、3 次元の Maxwell 方程 式を解き、電磁波の透過、反射、吸収、干渉、回 折などの現象を解析する。電磁波解析の手法には、 モーメント法、境界要素法、有限要素法、差分法 などがあり、それぞれに周波数領域の解法と時間 領域の解法があるが、Advance/ParallelWave が採用 しているのは時間領域差分法(FDTD 法)である。 FDTD 法の詳細等については、既刊の本誌記事[2] を参照していただきたい。

3. デバイスシミュレーション

Advance/TCAD システムは、半導体デバイスの 製造工程や電気特性を物理モデルに基づいてシ ミュレーションするソフトウェアである。プロセ スシミュレータ、デバイスシミュレータおよび統 合プラットフォームから構成される[3]。今回は、 デバイスシミュレータのみ使用する。

4. 光電変換機能

電磁波解析(光シミュレーション)から得られ る光吸収エネルギー分布をデバイスシミュレー タに取り込む(図 2)。光吸収により発生する電 子・正孔対分布を求め、デバイスシミュレーショ ンのメッシュファイル(*.dmsh)に記述する。メ ッシュファイルに記述された電子・正孔対分布は、 電流連続式の生成項*R*として使用される。



図 2 Advance/TCAD における光電変換の流れ

5. 解析事例

5.1. 太陽電池

5.1.1. 光シミュレーション

図 3に示したようなSi薄膜太陽電池に波長400 ~800nmの光を照射し、発生する光電流をシミュ レーションする。平坦な金属電極を用いたモデル と凹凸のある金属電極を用いたモデルについて シミュレーションを実行し、発生する光電流を比 較する。



図 3 光シミュレーションモデル(太陽電池)

平坦な金属電極を用いたモデルにおける光の 伝播の様子(電界の時系列データ)を図4に示す。 波長の長短に応じて光が伝播する様子が確認で きる。定常状態における光の吸収分布を図5に示 す。Siの消衰係数は、波長400nmの方が大きいた め、入射した表面近くの吸収度が高くなっている。



図 4 電界の時系列データ(太陽電池)



図 5 定常状態の光吸収分布(太陽電池)

次に、凹凸のある金属電極を用いたモデルにつ いて光シミュレーションを実行した結果を示す。 シミュレーションに用いたモデルを図 6 右に示す。

※ Si を非表示としている

平坦な金属のモデル(前述のモデル①)





凹凸のある金属のモデル

図 6 太陽電池モデル(左:裏面電極が平坦、 右:裏面電極に凹凸あり。)

光の伝播の様子(電界の時系列データ)を図 7 に、定常状態における光の吸収分布を図 8 にそれ ぞれ示す。





凹凸のある金属のモデル

※ 波長700 nmの場合

図 7 電界の時系列データ(左:裏面電極が平坦、 右:裏面電極に凹凸あり。)





```
平坦な金属のモデル(前述のモデル①)
```

凹凸のある金属のモデル

※ 波長700 nmの場合

図 8 定常状態の光吸収分布(左:裏面電極が 平坦、右:裏面電極に凹凸あり)

電極に凹凸があることによって、光の散乱が生 じ、電極近傍で光の吸収が高まっている。

5.1.2. デバイスシミュレーション

光吸収により発生した電子・正孔対の分布を取 り込み、デバイスシミュレーションを実行した。 図 9のような PN 接合を用意し、Si 層の上下に電 極を付加した。



図 9 デバイスシミュレーションモデル (太陽電池)

デバイスシミュレーションによって求めたゼ ロバイアス時の電流密度分布を図 10 に示す。光 吸収強度が高い領域(図 8)において、電流密度 が高くなった。





平坦な金属のモデル (前述のモデル①)

※ 波長700 nmの場合

Si 内部の電流密度分布(太陽電池) 図 10

図 11 に、電極間に発生する光電流と光の波長 の関係を示す。



図 11 発生した光電流(太陽電池)

金属電極の凹凸の有無に依存して、光電流に違 いが現れた。波長 500 nm と 700 nm では、金属電 極に凹凸がある方の光電流が高くなった。金属電 極の形状や PN 接合位置を調整することで、発生 する光電流をコントロールできると予想される。

5.2. 垂直色分離センサー

5.2.1. 垂直色分離センサー原理

図 12 に垂直色分離センサーの模式図を示す。 フォトン収集領域には PN 接合を利用する。光は 波長に依存した屈折率に応じて Si 基板中を伝播 する。波長の長い光は、Si の消衰係数が小さいた め、Si 基板深くまで光が侵入する。垂直色分離セ ンサーは、この性質を利用して、波長の異なる光 (青色光、緑色光、赤色光)を電気信号に変換する。



図 13にP型領域とN型領域の断面分布を示す。 光の侵入長を考慮して PN 接合の位置を決めた。 光電流を収集するための電極を基板表面に形成 するために、分布を図のような入れ子状にした。



図 13 デバイスシミュレーションモデル (垂直 色分離センサー)

5.2.2. 光シミュレーション

図 14に光シミュレーションの計算モデルを示す。



図 14 光シミュレーションモデル (垂直色分離 センサー)

図 15、図 16 に光シミュレーションの結果を示 す。波長の長い光ほど、侵入長が伸びている。



[※] λ:光の波長、n:Siの屈折率、k:Siの消衰係数

図 15 電界の時系列データ(垂直色分離センサー)



[※] λ:光の波長、n:Siの屈折率、k:Siの消衰係数

図 16 定常状態における光の吸収分布(垂直色 分離センサー)

5.2.3. デバイスシミュレーション

光吸収によって生じた電子・正孔対分布を取り 込み、ゼロバイアスのデバイスシミュレーション を実行した。

図 17 に光電流値(Ib, Ig, Ir)の定義を示す。ま た、図 18 にデバイスシミュレーションによって 求めた電流密度分布と光電流値を示す。赤色の領 域で電流密度が高く、青色の領域で電流密度が低 い。電極と Si 基板とが接触する領域で電流密度が 高くなっていることが分かる(赤色の領域)。ま た、光吸収によって電子・正孔対が発生し、電極 に向かって流れている様子が見られる(緑色の領 域)。青色光、緑色光、赤色光それぞれに起因す る光電流 Ib, Ig, Ir が発生しており、光センサーの シミュレーションに成功しているといえる。



図 17 光電流値 (Ib, Ig, Ir) の定義 (垂直色分離 センサー)



Ib	3.800×10^{-17}	Ib	2.300×10^{-17}	Ib	0.770×10^{-17}
Ig	$0.180\times10^{\text{-}17}$	Ig	2.600×10^{-17}	Ig	1.500×10^{-17}
Ir	$0.012\times10^{\text{-}17}$	Ir	0.640×10^{-17}	Ir	1.500×10^{-17}

図 18 Si内部の電流密度と発生した光電流

6. まとめ

当社が開発した電磁波解析ソフトウェア Advance /ParallelWave および LSI デバイス設計 CAD シス テム Advance/TCAD を使用して、光-半導体連成解 析を行った。計算事例として、太陽電池および垂 直色分離センサーを取り上げた。

太陽電池では、裏面電極に凹凸形状を作り、PN 接合位置を調整することで、光電流値を上げるこ とができた。垂直色分離センサーでは、青色光、 緑色光、赤色光それぞれに起因する光電流 Ib, Ig, Ir が発生することを確認した。これら光-半導体 連成解析の計算事例を通して、当社ソフトウェア が有用な設計支援ツールであることが示された。

参考文献

- [1] R. B. Merrill, U. S. Patent No. 5,965,875,
- [2] "Color separation in an active pixel cell imaging array using a triple-well structure," 1999.
- [3] 大規模電磁波解析ソフトウェア
 Advance/ParallelWave の開発, 並木武文ほか,
 2016年, アドバンスシミュレーション Vol. 23.

- [4] 大規模 3 次元 TCAD システム
 Advance/TCAD, 大倉康幸ほか, 2016 年, ア
 ドバンスシミュレーション Vol. 23.
- ※ 技術情報誌アドバンスシミュレーションは、 アドバンスソフト株式会社 ホームページのシ ミュレーション図書館から、PDF ファイルが ダウンロードできます。(ダウンロードしてい ただくには、アドバンス/シミュレーションフ ォーラム会員登録が必要です。)