

2次電池CADシステムの開発構想

2010年2月18日
アドバンスソフト株式会社

構想の背景と主旨

・ 提案の背景

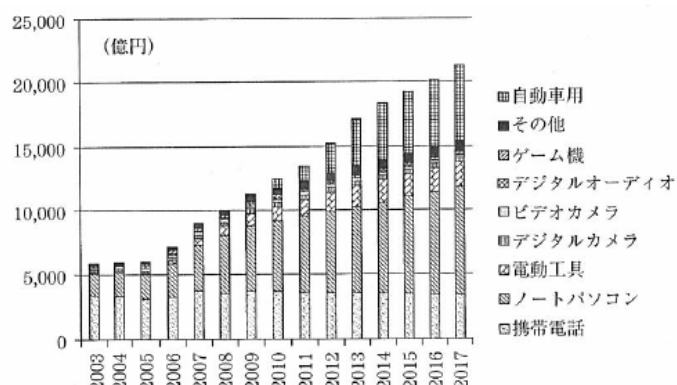
クリーンエネルギーであるリチウム電池などの2次電池は自動車、電機をはじめとした全産業の基幹技術として、熾烈な研究開発競争が行われている。

この研究開発を飛躍的に加速し、効率化、高度化する技術としてコンピュータを用いたシミュレーションを中心としたCADシステムの開発が期待されている。実際、半導体LSIではCADシステムが大成功をおさめ、LSIの急速な発展の大きな原動力となっている。

しかしながら、現時点では実用的な2次電池CADシステムは存在しない。わが国は2次電池CADシステムに必要なシミュレーション技術については多くの蓄積があり欧米に引けをとらない。わが国の技術を結集し、世界に先駆け2次電池CADシステムを開発することは、わが国が2次電池産業分野で世界をリードする大きな原動力となると考えられる。

リチウムイオン電池の市場の特徴

- 市場が急速に拡大している。2017年には現在の約2倍 2兆円を超える規模となる。



- 寡占化が進んでいない。 トップの三洋電機でも20%程度。 原因
 - ・ 産業が成長期にある
 - ・ 技術バリエーションの多さ、異なる技術でも性能・価格面での差別化が困難

CADを用いた効率的な研究開発が必要不可欠

- CADシステムの市場規模
古い資料ではLSIでは生産額の2.8%がCADシステムに投入されている。
生産額の1%として100 - 200億円の市場規模がある。

3

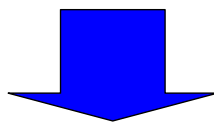
2次電池の研究開発

試行錯誤から科学に基づく研究開発, 設計

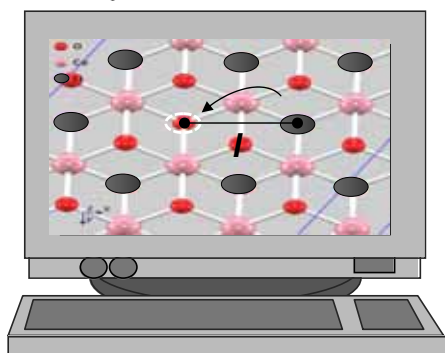


経験と感に基づく
じゅうたん爆撃的
探索

CADシステム



シミュレーション
に基づく効率的2次
電池開発



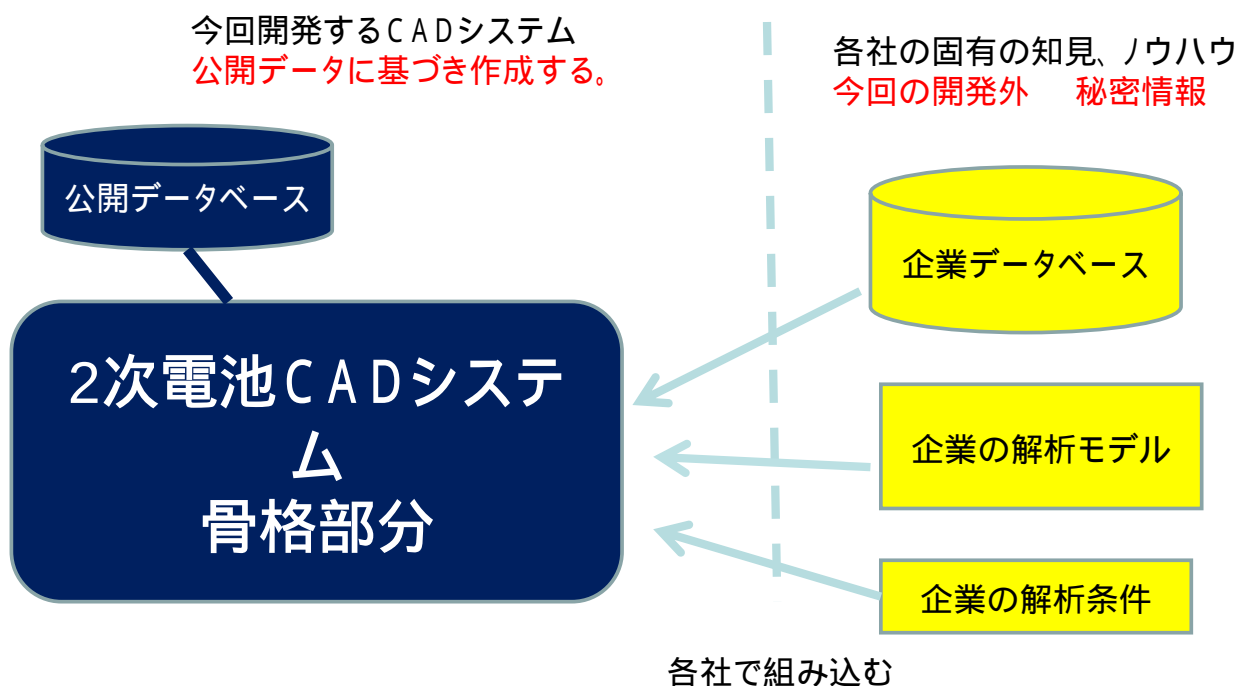
4

2次電池CADシステムの構想

- 2次電池の開発は、材料、形状などさまざまな技術開発の余地がある。
- 効率的な研究開発が技術競争の鍵を握っている。
- このような状況は20 - 30年前の半導体LSI開発の状況に類似している。
- 半導体LSI研開発ではCADシステムが必須のツールとして活用されてきた。
- 半導体LSI開発を参考に2次電池CADシステムの開発を構想する。

5

2次電池CADシステムの構想



6

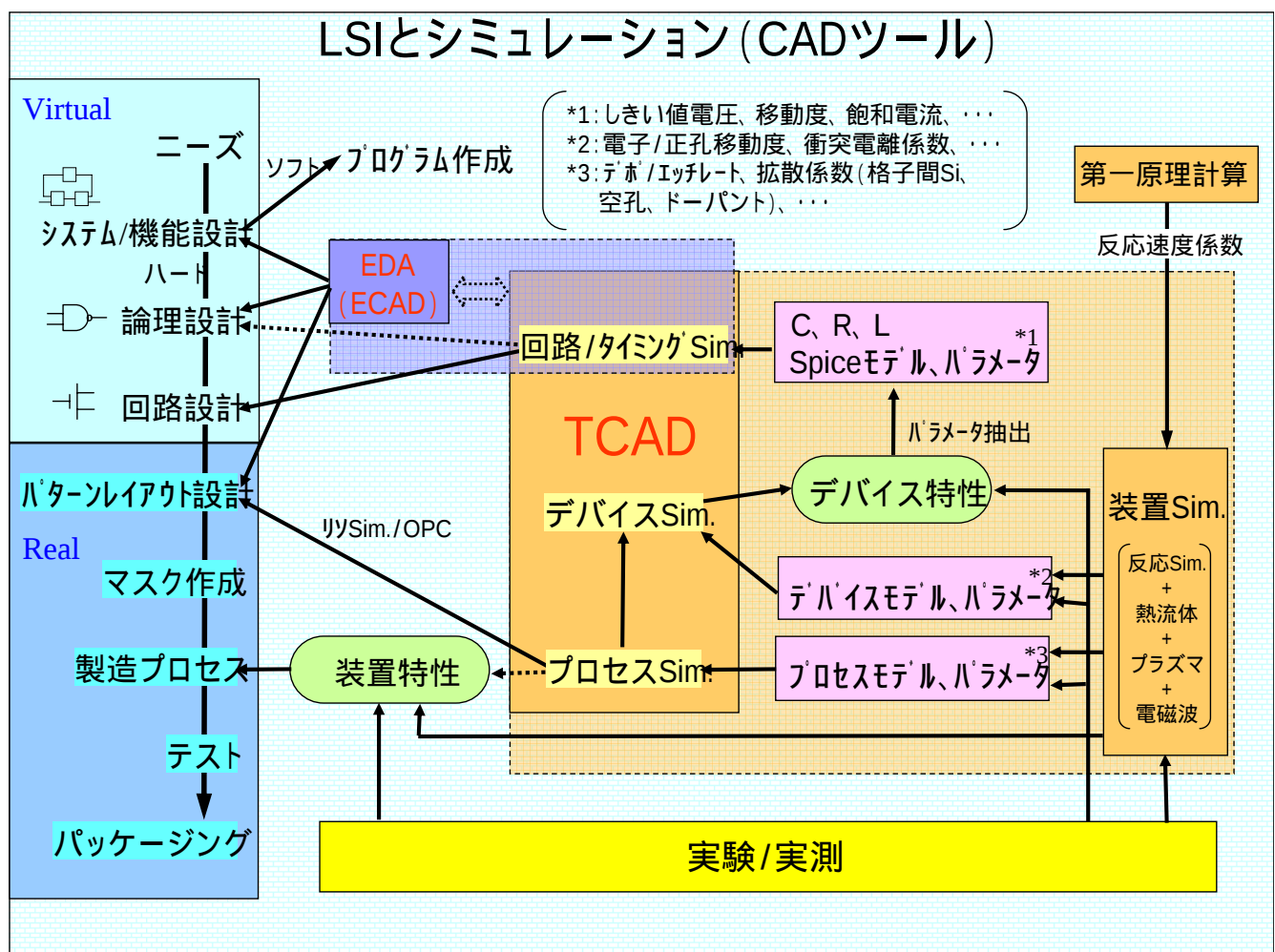
LSI設計用CAD TCAD

TCAD(Technology CAD)は、半導体のLSIの製造プロセスを物理モデルに基づきシミュレーションするプロセスシミュレータと作成されたLSIのトランジスタの電流－電圧特性をシミュレーションするデバイスシミュレータから構成される。LSIのCADシステムはTCADのほかに論理シミュレータ、レイアウトなどのEDAと回路シミュレータがあるが、2次電池CADシステムはTCADに対応するものである。

TCADは1970年代半ばにスタンフォード大学のダットン教授らが開発した最初のプロセスシミュレータSUPREMに端を発している。SUPREMは簡単な1次元シミュレータで、実験式をベースに、深さ方向の不純物分布を計算することができる。不純物分布を実験的に直接求めることができないので、このシミュレータは簡単であったにもかかわらずLSIの開発に大きな貢献をし、TCADシステムの重要性が認識された。

SUPREMの革新性は、複雑な製造プロセスを一貫してシミュレートし、設計技術者が必要とする不純物分布を計算できたところによる。個々の計算モデルや計算方法に目新しいものはない。

7



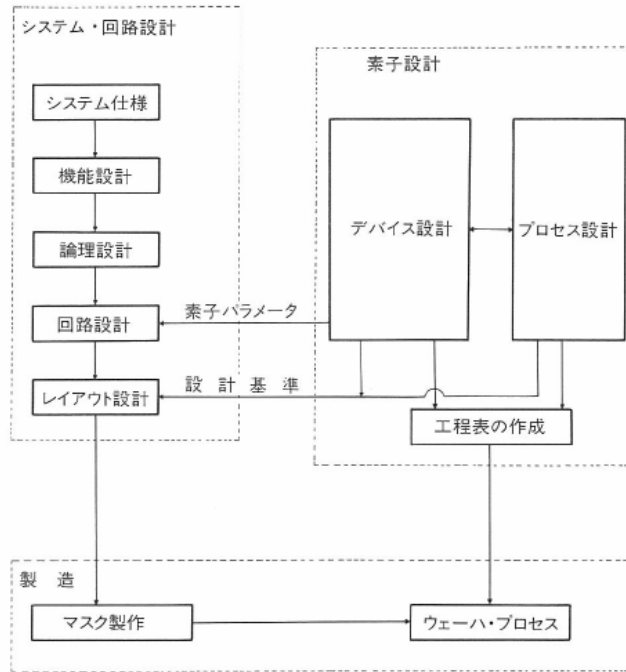


図 1.1 LSI の設計手順

LSI設計CADシステム

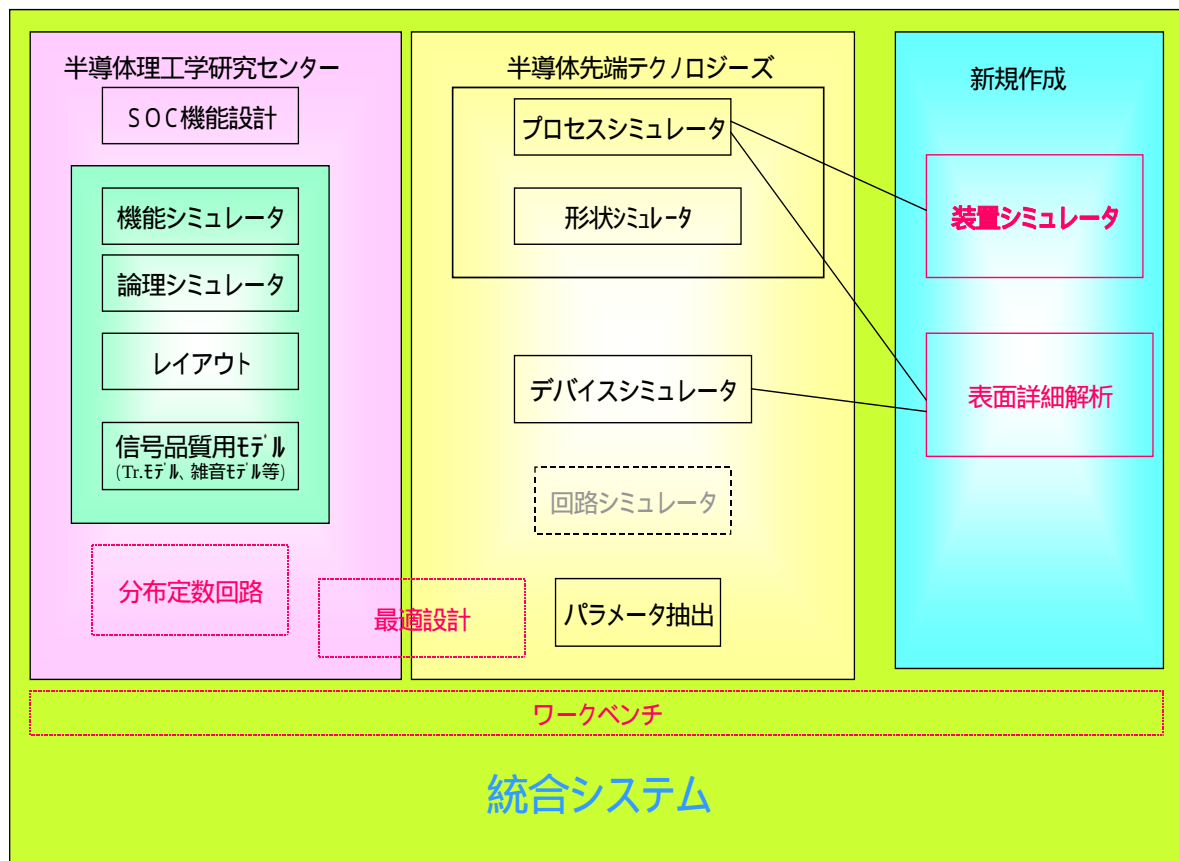


表 1.2 半導体素子設計シミュレータの概要^(*)

設計	シミュレータ	概 要	代表的シミュレータ	参考文献
プロセス設計	プロセス・シミュレータ	半導体製造プロセス・データを入力し、半導体素子内の不純物濃度分布を求める。	SUPREM III SUPREM IV SUPRA VS-P/B POLAR-2 D	2 3 4 5 6
	形状シミュレータ	半導体製造プロセスの形状加工に関するデータを入力し、半導体素子の形状を求める。	SAMPLE VS-M/B DEPICT-2	7 8 —
	総合プロセス・シミュレータ	プロセス・シミュレータと形状シミュレータを統合したもの。半導体製造プロセス・データを入力することにより不純物濃度分布と形状を同時に求める。	SIMPL-2 COMPOSITE	9 10
	個別工程シミュレータ	半導体製造プロセスの個々の工程を詳細にシミュレートする。イオン注入、酸化、CVD 等の工程を詳細に解析する。	BTE-2 D LASER-2 D/A	— —
デバイス設計	デバイス・シミュレータ	不純物濃度分布とデバイス形状および電圧条件を入力し、半導体デバイスの電気特性を求める。	MINIMOS PISCES-2 B VENUS-2 D/B VENUS-3 D	11 12 13 14
	パラメータ抽出プログラム	デバイス・シミュレータで求めた電気特性より回路解析に必要な素子モデル式のパラメータを抽出する。	TOPEX PARAM	— —
デバイス・設計	素子設計総合シミュレータ	半導体製造プロセス・データから素子の不純物濃度分布、形状、電気特性を一貫して求める。	VEGA	15
回路設計	回路シミュレータ	電子回路の配線情報、素子の電気特性および電源情報より電子回路の電圧、電流の挙動を計算する。	SPICE 2 FCAP SPLICE RELAX	16 17 18 19
	LCR 計算プログラム	LSI の微細化に伴い配線間の容量、インダクタンスや配線の抵抗の計算が難しくなっている。LCR 計算プログラムはこれらの値を計算する。	LCR-3 D	—

(*) 代表的シミュレータは一般に入手可能なものに限った。

11



図 3.3 VS-P/B の機能

12

表 3.1 VS-P/B の概要

項 目	概 要
イオン注入工程	● LSS 理論と BTE 法を選択できる ● LSS 理論は Gauss 分布と Pearson IV 分布である ● 多層膜近似を利用する ● BTE 法は一次元解析をする ● 誤差関数により一次元分布を二次元分布に拡張する
拡散工程	● 電界効果を含む拡散方程式を数値解析する ● 拡散モデルは濃度依存性、クラスター・モデルを考慮する ● リンの高濃度拡散等を考慮する ● 酸化時の増速拡散効果を考慮する ● 界面での偏析効果を考慮する
酸化工程	● 酸化膜厚は Deal と Grove の式を用いる ● 横方向の酸化膜厚は誤差関数の重ね合わせによる
エッチング工程	● 指定された領域を削除する
堆積工程	● 指定された材料を指定された厚さだけ堆積させる
エピタキシャル成長工程	● シリコン材料の上方にシリコンをエピタキシャル成長させる ● オート・ドーピング効果を考慮する ● エピタキシャル成長中は不純物拡散を考慮する
数値解法	● 拡散方程式は差分法により離散化する ● 拡散方程式の時間項は前進差分法により離散化する ● 空間項は Du Fort と Frankel 法により離散化する ● 界面の位置は真の境界と数値計算上の境界を併用する
入 力	● プロセス・シーケンス・データにより入力する ● 入力データはフリー・フォーマット形式である ● リスタート計算ができる
出 力	● 以下の出力項目がある - プリント出力 - 材料インデックス - 物理量の分布 - グラフィック出力 - 一次元断面図 - 二次元等濃度線図 - 鳥瞰図 - 計算結果ファイル出力 - デバイス・シミュレータ用ファイル出力

13

TCADシステムと2次電池CADシステム

その後、ダットン教授のシミュレータを販売するベンチャー会社が設立され、2次元、3次元のプロセスシミュレータやデバイスシミュレータが開発され、解析モデルや解析手法も大幅な進歩をとげた。

現在はLSIの設計に不可欠なツールとなっている。

TCADシステムも米国製に設計されており、わが国の半導体メーカーも大金を支払って、米国製のシミュレータを利用している。

2次電池CADシステムは複雑な物理化学現象を総合的に解析し最終的に設計技術者が必要とする情報を計算する必要があるという意味でTCADシステムに類似している。

14

2次電池CADシステムの概要

材料と設計図をインプットとして電池の特性を予測できるトータルなシミュレーション・ツール

解析すべき項目

- ・起電力
- ・電極表面構造
- ・電極内電荷移動
- ・電解質中のイオン伝導
- ・ポテンシャルデータベース作成

- ・拡散係数、イオン移動度、電荷移動エネルギー障壁、電荷移動係数 → **内部抵抗**
- ・発熱量、材料の応力歪関係 → **安全性**
- ・亀裂発生メカニズム解析 → **寿命**

- ・電裂解析シミュレーション → **寿命**
- ・デンドライト解析シミュレーション → **安全性**

2次電池CADシステムのおもな構成要素

制御プログラム

第一原理材料解析シミュレータ

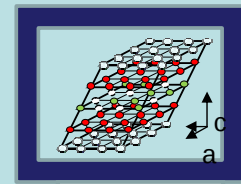
古典分子動力学シミュレータ

粗視化材料解析シミュレータ

亀裂解析シミュレータ・デンドライト解析シミュレータ

構造データベース

ポテンシャルデータベース



GUI