

令和 3 年 6 月 21 日現在

機関番号：34406

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2017～2020

課題番号：17K06386

研究課題名（和文）モンテカルロ法によるシングルフォトンアバランシェダイオードの解析

研究課題名（英文）Analysis of Single Photon Avalanche Diode with Monte Carlo Simulation

研究代表者

鎌倉 良成（Kamakura, Yoshinari）

大阪工業大学・情報科学部・教授

研究者番号：70294022

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,700,000円

研究成果の概要（和文）：シリコンを材料として用いたシングルフォトンアバランシェフォトダイオードの動作を模擬するためのフルバンドモンテカルロシミュレータを開発し、それを用いて素子内部におけるアバランシェ破壊の素過程を分析した。さらに、キャリア輸送モデルが整備されていない材料を利用したフォトダイオードの性能予測を行うためのシミュレーションフレームワークを構築し、超格子を用いた赤外線受光素子の設計指針を示した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

微弱な光を検出する半導体デバイスの特性を計算機上でシミュレーションするためのフレームワークを開発することで、アバランシェ破壊を利用する光信号増幅の物理的素過程への理解を深めることができた。さらに将来的に応用が期待されている新規半導体材料を用いた高性能素子の設計に資する、新たなシミュレーション方法論を確立することができた。

研究成果の概要（英文）：A simulation tool based on the full-band Monte Carlo method has been developed to investigate the device characteristics as well as the internal microscopic processes in the single photon avalanche photodiode. Furthermore, a simulation framework has also been developed to investigate the properties of InAs/GaSb type-II superlattice for detecting light in the mid wavelength infrared region, and the physical mechanisms related to the dark current and the quantum efficiency were clarified, which could contribute to design the higher performance infrared photodetectors.

研究分野：半導体工学

キーワード：フォトダイオード、モンテカルロシミュレーション、アバランシェ破壊、赤外線検出素子、InAs/GaSbタイプ、超格子

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

## 1. 研究開始当初の背景

シングルフォトンアバランシェダイオード (SPAD) は、半導体を用いた光子計数デバイスである。応用範囲は広く、陽電子放射断層撮影 (PET)、生体の蛍光撮像、車載用イメージングレーザーレーダー、量子暗号通信システム等、単一光子の検出が可能な感度と高い時間分解能が求められる多彩な計測・撮像分野で広く利用されており、高性能・高機能化を目指した技術開発が精力的に進められている。現象の発見自体は 1960 年代に遡るが、その複雑さゆえ詳細な機構の理解は未だ十分とは言えず、素子の工学設計に資するシミュレーション・モデリング技術の整備が強く望まれている。現象の理解を難しくさせている一因は、インパクトイオン化が確率的事象であるということにある。すなわち、光子を吸収してからパルス電流が発生するまでの時間には原理的にばらつきが避けられず、これが SPAD の時間分解能を律速するジッター (光子吸収からパルス出力発生までの時間ばらつき) の主因となる。これを理解予測すべく、様々なコンピュータ解析が今まで試みられてきた。中でも強力な手法として期待されているものがモンテカルロ (MC) シミュレーションである。これは半導体中のキャリア (電子と正孔) を粒子でモデル化し、各々の確率的挙動 (電界加速と散乱の繰り返し) を計算機上で追跡する電気伝導シミュレーション法の一種で、多くの半導体デバイス解析、とりわけマイクロな物理機構の分析等の手段として用いられてきた。ただ、SPAD 解析にも適用された例はあるものの、重い計算リソースを必要とする理由等から、適用範囲は単純な系を仮定した初歩的分析にとどまっていた。

## 2. 研究の目的

本研究では、SPAD の数値シミュレーション解析を行い、アバランシェ破壊の物理機構について理解を深めることを第一の目的とする。SPAD の時間分解能を律速する究極の要因と考えられる「統計的ゆらぎ」を計算機上で再現することで、ジッターに関与する本質的な物理過程を明らかにする。さらに、キャリア輸送モデル・パラメータが未だ整備されていない材料をアバランシェ増倍層に利用した際の素子性能予測に資するため、シリコン以外の材料のシミュレーションモデル開発を行う。具体的には、化合物半導体を用いた超格子系材用の材料物性値をバンド計算から求め、その結果を半導体デバイスシミュレーションに反映する新たなフレームワーク構築を目指す。

## 3. 研究の方法

(1) 代表者がこれまで研究を行ってきたフルバンド MC シミュレーション技術を機能拡充し、シリコンデバイス中のアバランシェ過程を計算機上で再現する粒子法ベースのデバイスシミュレータを開発した。フルバンド MC シミュレーションは、エネルギーバンド計算によって求めたキャリアの波数ベクトルとエネルギーの関係をルックアップテーブルとしてプログラム内部に保有し、そのデータを随時参照しながら、キャリア挙動を計算するキャリア輸送解析法である。特に、高電界下で発生するホットキャリアの振る舞いを高精度に模擬できることから、アバランシェ破壊の要因となるインパクトイオン化現象をシミュレーションするため適した手法として知られている。本研究では、代表者がこれまでバルクシリコン用に開発してきたフルバンド MC シミュレータに対し、(i) 複数個の電子と正孔を同時にシミュレーションする機能、(ii) キャリアの生成と消滅を取り扱う機能、(iii) 3次元ポアソン方程式を解き、時々刻々変化するキャリア分布に応じて系内部の電界分布を変化させる機能、等を追加し、半導体デバイス内部のアバランシェ破壊過程を計算機上で「可視化」するツールを開発した。

(2) 研究後期の目標として掲げたシリコン以外の材料、とくに赤外領域を対象とした化合物半導体の特性予測解析を行った。着目した系は、InAs/GaSb タイプ II 超格子である。中遠赤外域の光検出素子の特性理解と設計に寄与するシミュレーションを行うため、 $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$  摂動法に基づくバンド計算から抽出した材料パラメータをドリフト-拡散型デバイスシミュレータに取り入れる新たなフレームワークを構築した。さらに、このツールを用いることで、様々な積層周期あるいは積層比を有する超格子を用いた赤外線検出素子の特性を調べた。

## 4. 研究成果

(1) これまで開発したバルクシリコン中のキャリア輸送解析用のフルバンド MC シミュレータをベースに、SPAD 内部のアバランシェ破壊解析のための新たなシミュレータを開発した。3次元のポアソン方程式ソルバと結合しながら、電子と正孔の同時輸送解析を実現するとともに、アバランシェ破壊過程の動画を出力することもできる。図 1 にシミュレーション結果の例を示す。実空間ならびにエネルギー空間上の電子と正孔の動きを示すことで、アバランシェ破壊現象に内在する物理素過程の理解支援につながるものと考えている [1]。

さらに、開発したシミュレータを用いて、シングルフォトンアバランシェフォトダイオードの応答ばらつきに関する解析を行った。その結果、素子に同一の電圧を加えた場合でも、電界分布形状によって SPAD 応答時間分布は異なり、局所的な高電界領域が存在する場合ほどばらつきが小さくなることが分かった。一方で、確率は低いものテイル領域にこぶ状の分布が確認された。

インパクトイオン化を起こさず高電界領域を通過した初期電子が SPAD 中央部で電子-正孔対を生成し、その正孔が逆方向に走行して高電界領域に侵入することでアバランシェ増倍を誘発する過程が、このテイル分布を形成しているものと考えられる。

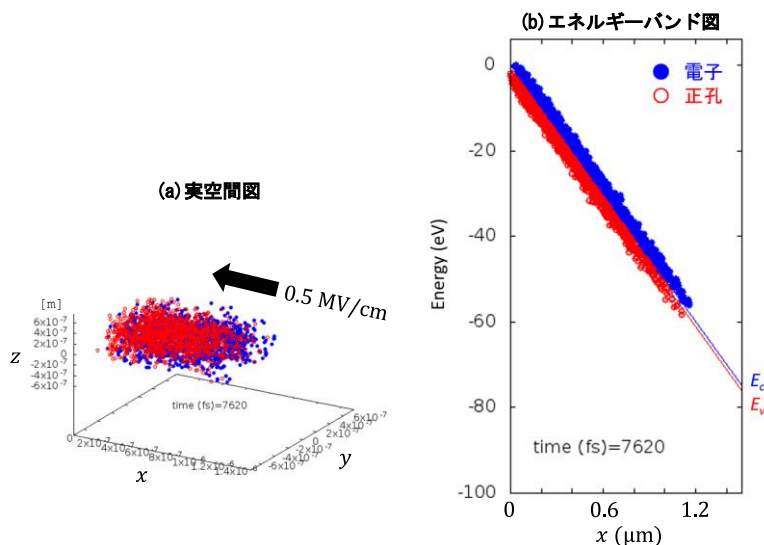


図1 フルバンド MC シミュレータによるアバランシェ破壊の解析結果の一例。(a)実空間上、および(b)エネルギー空間上における電子(青)と正孔(赤)の分布を示している。

(2) InAs/GaSb タイプ II 超格子を用いた赤外線検出素子をシミュレーションするためのフレームワークを構築した。このシミュレータでは、 $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$  摂動法に基づくバンド計算から抽出したパラメータ(バンドギャップ、有効状態密度)をドリフト-拡散型デバイスシミュレータに取り入れることで、様々な積層周期あるいは積層比を有する超格子を用いた赤外線検出素子の特性を調べることができる。図2は、このツールを用いて、3種類の積層比  $R$  を有する超格子を受光層に用いたフォトダイオード内部のポテンシャルおよび電界分布を計算した結果である。その系内部の電流を見積もったところ、たとえ同一のカットオフ波長を有する場合でも超格子の積層比により暗電流特性が異なることが分かった。また、特に低バイアス条件下では、InAs 層の比率の高い超格子ほど暗電流を抑制できる傾向があり、その原因が真性キャリア密度の違いにあることを明らかにした。一方で、受光層のドーピング濃度が高い素子に大きな逆バイアスを加えた場合には、逆に GaSb 層の比率の高い超格子ほど暗電流を低減できる可能性があることを指摘し、キャリア有効質量が重いことがトンネリングに起因するリーク電流抑制に繋がるとの見解を示した[2]。

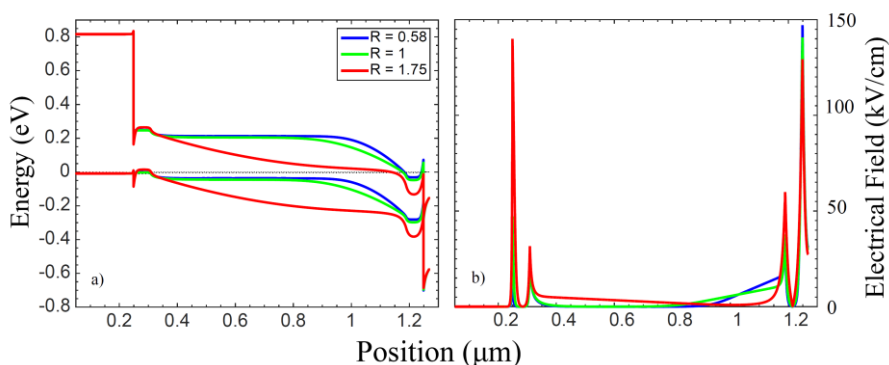


図2 InAs/GaSb タイプ II 超格子を用いた p-i-n フォトダイオードのシミュレーション結果。(a) エネルギーバンド図と (b) 電界分布を示している。3 種類の超格子の積層比  $R$  を仮定した場合の結果を比較した [2]。

(3) 研究成果(2)の議論を発展させ、より系統的に InAs/GaSb タイプ II 超格子の諸特性を考察した。 $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$  摂動法に基づくバンド計算に基づき、図3のように、赤外線検出素子の性能に関わる各種パラメータの変化を InAs 層と GaSb 層の厚さの関数として調べた結果、暗電流性能に対しては、短周期の超格子、とりわけ GaSb 層の薄い構造が有利であることが分かった。これは、Shockley Read Hall 機構に基づくリーク電流が、キャリア有効質量の軽い、すなわち小さい真性キャリア密度を有する場合ほど抑制されるためであり、逆に高電界下においてこの性質はトンネル電流

を増大させる懸念要因となり得ることも示唆している。さらに本研究では、受光特性についても議論を展開し、超格子の短周期化に伴うキャリア有効質量の減少は、結合状態密度すなわち光吸収係数の低下を招くため、量子効率向上という観点からは不利となることを指摘した[3]。

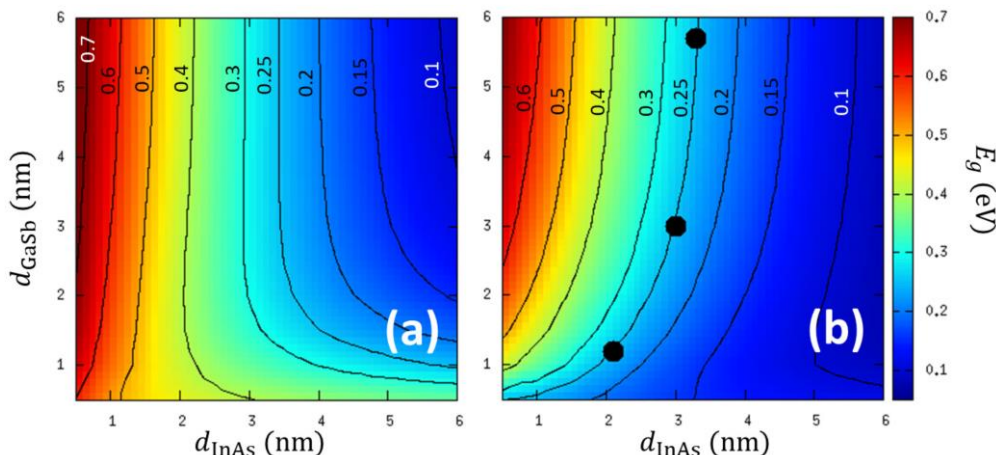


図 3 InAs/GaSb タイプ II 超格子のバンドギャップエネルギーの計算結果。InAs 層の幅  $d_{\text{InAs}}$  と GaSb 層の幅  $d_{\text{GaSb}}$  の関数としてプロットしている。InAs/GaSb 界面の非対称効果を考慮しなかった場合 (a) と比べ、考慮した結果 (b) は実験データ (黒点) を良好に再現している [3]。

(4) 内部に障壁層を設けた赤外線検出素子の特性および設計指針についての知見を得た。具体的構造としてこれまで提案されている pBn および nBn 構造を取り上げ、本研究で構築したシミュレーションフレームワークを活用しながら障壁層のドーピング濃度の最適化について考察した結果、図 4 のように暗電流を抑制するためには両構造とも最適なドーピング濃度が存在することを見出した。さらに、暗電流の主要因はそれぞれの構造で異なることから、リーク電流に関連する物理機構を想定した上での素子設計が重要となることを指摘した[4]。

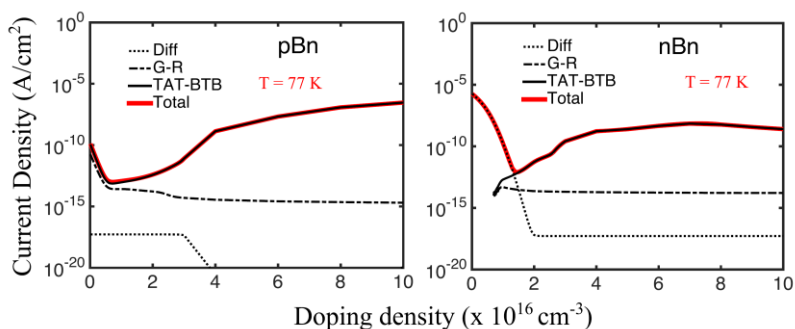


図 4 pBn 型および nBn 型赤外線検出素子における暗電流のシミュレーション結果。障壁層のドーピング濃度の関数としてプロットした[4]。

<引用文献>

[1] 鎌倉 良成, “デバイスシミュレーションによる電気伝導機構の理解支援 ～授業等での活用事例のご紹介～,” 第 65 回応用物理学会春季学術講演会, 18p-A202-3 (2018).

[2] Yen Le Thi, Yoshinari Kamkura, and Nobuya Mori, “Simulation of Dark Current Characteristics of Type II InAs/GaSb Superlattice Mid-wavelength Infrared p-i-n Photodetector,” Jpn. J. Appl. Phys. **58**, 044002 (2019).

[3] Yen Le Thi, Yoshinari Kamkura, and Nobuya Mori, “Evaluation of the Optical Characteristics of Type II InAs/GaSb Superlattice Infrared p-i-n Photodetector,” Jpn. J. Appl. Phys. **58**, 081003 (2019).

[4] Yen Le Thi, Yoshinari Kamkura, and Nobuya Mori, “A Comparison of Mechanisms for Improving Dark Current in pBn and nBn Barrier Infrared Photodetectors,” Jpn. J. Appl. Phys. **59**, 044005 (2020).

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計3件（うち査読付論文 3件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Yen Le Thi, Yoshinari Kamakura and Nobuya Mori	4. 巻 58
2. 論文標題 Evaluation of the optical characteristics of a type-II InAs/GaSb superlattice infrared p-i-n photodetector	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 081003(1-8)
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.7567/1347-4065/ab2b67	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yen Le Thi, Yoshinari Kamakura and Nobuya Mori	4. 巻 59
2. 論文標題 A comparison of mechanisms for improving dark current characteristics in barrier infrared photodetectors	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 044005(1-6)
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.35848/1347-4065/ab7e77	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yen Le Thi, Yoshinari Kamakura, Nobuya Mori	4. 巻 58
2. 論文標題 Simulation of dark current characteristics of type-II InAs/GaSb superlattice mid-wavelength infrared p-i-n photodetector	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Jpn. J. Appl. Phys.	6. 最初と最後の頁 044002(1-7)
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.7567/1347-4065/ab03ca	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計6件（うち招待講演 1件 / うち国際学会 2件）

1. 発表者名 鎌倉良成
2. 発表標題 デバイスシミュレーションによる電気伝導機構の理解支援 ~ 授業等での活用事例のご紹介 ~
3. 学会等名 第65回応用物理学会春季学術講演会（招待講演）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Yen Le Thi, Yoshinari Kamakura, Takeharu Goji Etoh, Nobuya Mori
2. 発表標題 Analysis of Type II InAs/GaSb Superlattice Mid-wavelength Infrared p-i-n Photodetector Using Device Simulation
3. 学会等名 7th International Conference on Integrated Circuits, Design, and Verification (ICDV) 2017 (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Yen Le Thi, Yoshinari Kamakura, Nobuya Mori
2. 発表標題 A Simulation Analysis of Electrical Characteristics of Type II InAs/GaSb Superlattice Mid-wavelength Infrared p-i-n Photodetector
3. 学会等名 第65回応用物理学会春季学術講演会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Yen Le Thi, Yoshinari Kamakura, Takeharu Goji Etoh, NobuyaMori
2. 発表標題 Device Simulation of Barrier Infrared Photodetectors Using InAs/GaSb Superlattice
3. 学会等名 21st International Conference on Electron Dynamics in Semiconductors, Optoelectronics and Nanostructures (EDISON) 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Yen Le Thi, Yoshinari Kamakura, NobuyaMori
2. 発表標題 Reducing Dark Current Mechanisms for Barrier Infrared Photodetector Using Type II InAs/GaSb Superlattice
3. 学会等名 第80回応用物理学会秋季学術講演会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Yen Le Thi, Yoshinari Kamakura, NobuyaMori
2. 発表標題 A model of dark current mechanism in barrier infrared photodetectors
3. 学会等名 電子情報通信学会 エレクトロニクスソサイエティ シリコン材料・デバイス(SDM)研究会
4. 発表年 2020年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関		
ベトナム	Hanoi Univ. Science and Technology		