

光学・デバイス統合シミュレーションによる 小画素撮像素子の特性解析

武藤 秀樹

Analysis of Small Pixel Image Sensors by Combination of Optical and Device Simulations

Hideki MUTOH

Importance of optical and device simulations for image sensors is increasing with reduction of their cell size. Especially, the combination of wave optical simulation and device simulation is strongly needed to analyze sensitivity and crosstalk characteristics for small pixel CMOS image sensors. The mathematical models and examples of the combined simulation for crosstalk characteristics are shown in this paper. The problems of the combined simulation models and their solutions are also discussed. In order to consider propagation delay of the electromagnetic field induced by gate electrodes, modification of Maxwell's equations by using the scalar field is needed for analysis of high-speed image sensors.

Key words: optical simulation, device simulation, combined simulation, image sensor, crosstalk, sensitivity, Maxwell's equations, scalar field

イメージセンサーの小型化が進むにつれて、感度、ダイナミックレンジ、ノイズ、色再現といった特性の悪化が問題となる。これらの特性の向上を図る上で、光学およびデバイス・シミュレーションはきわめて重要である。現在、 $1\ \mu\text{m}$ 角程度の大きさの画素が開発されているが、画素サイズが $2\ \mu\text{m}$ 以下になると光の波動性が大きな問題となり、波動光学シミュレーションが必要になる。本稿では、光学・デバイス統合シミュレーションの計算モデルと小画素撮像素子の特性解析例について解説し、最後に統合シミュレーションの課題と展望について述べる。

1. 計算モデル

1.1 光学シミュレーション

解析対象が入射光波長に比べて十分大きく、薄膜による光の干渉や、遮光膜端の回折が問題とならないような場合には、光線追跡が用いられるが、 $2\ \mu\text{m}$ 以下のセル構造や反射防止膜のような薄膜による干渉、もしくは遮光膜端の回折を考慮しなければならない場合には、FDTD (finite

difference time domain) 法、境界要素法や局所境界要素法による波動光学シミュレーションが必要になる。解析対象に応じてこれらの解析方法を使い分ける必要がある。

1.1.1 光線追跡法

多数の光線を対象構造に入射し、物質境界面においてスネルの法則に基づいて屈折角を求める。すなわち、屈折率 n_1 と n_2 の物質境界で入射角 θ_1 、屈折角 θ_2 の屈折が生じる場合、スネルの法則により

$$n_1 \sin \theta_1 = n_2 \sin \theta_2 \quad (1)$$

の関係が成り立つ。このとき、物質境界面における反射率 R および透過率 T は、以下のフレネルの式を用いて、入射角と屈折角から算出する¹⁾。

$$R = \frac{1}{2} \left\{ \frac{\tan^2(\theta_2 - \theta_1)}{\tan^2(\theta_2 + \theta_1)} + \frac{\sin^2(\theta_2 - \theta_1)}{\sin^2(\theta_2 + \theta_1)} \right\} \quad (2)$$

$$T = \frac{\sin 2\theta_2 \sin 2\theta_1}{2 \sin^2(\theta_2 + \theta_1)} \left\{ 1 + \frac{1}{\cos^2(\theta_2 - \theta_1)} \right\} \quad (3)$$

1.1.2 FDTD 法

電界を \mathbf{E} 、磁界を \mathbf{H} で表し、 μ, ε をそれぞれ透磁率と誘

リンク・リサーチ(株) (〒250-0055 小田原市久野 291-4) E-mail: hideki.mutoh@nifty.com

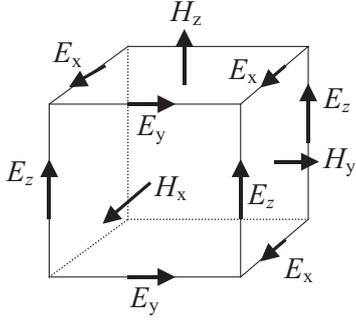


図1 FDTD法のグリッドと電磁場ベクトルの関係.

電率とすると、マクスウェル方程式は以下の式で表される.

$$\mathbf{J} = \nabla \times \mathbf{H} - \varepsilon \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \quad (4)$$

$$\rho = \varepsilon \nabla \cdot \mathbf{E} \quad (5)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} + \mu \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} = 0 \quad (6)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{H} = 0 \quad (7)$$

なお、式(4)と式(5)はただちに以下の電荷保存の式を与える.

$$\nabla \cdot \mathbf{J} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \quad (8)$$

σ を導電率とすると、電流 \mathbf{J} は $\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}$ で置き換えられるので、式(4)と式(6)は以下のように書き換えられる.

$$\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = -\frac{\sigma}{\varepsilon} \mathbf{E} + \frac{1}{\varepsilon} \nabla \times \mathbf{H} \quad (9)$$

$$\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} = -\frac{1}{\mu} \nabla \times \mathbf{E} \quad (10)$$

これらの方程式を解くために、差分法を用いて時間および空間の離散化を行う。図1に示すように、電界と磁界を空間的に半セルずれた位置で、時間軸においては半ステップずれた時刻で定義する。入射光に対応する境界条件を設定し、一定時間経過するまで電界と磁界を交互に逐次代入することにより、時間に依存した電界と磁界を求めることができる^{2,3)}。

1.1.3 境界要素法および局所境界要素法

境界要素法および局所境界要素法は定常状態の電磁場を解く。角振動数 ω の電磁場の時間依存部分を $\exp(-i\omega t)$ とし、電場と磁場の空間依存部分を \mathbf{E}_0 と \mathbf{H}_0 として、オームの法則を満たす電流以外に高周波で振動する電流や電荷が存在しないと仮定すると、式(6)と式(9)より

$$\nabla \times \mathbf{E}_0 = i\omega\mu \mathbf{H}_0 \quad (11)$$

$$\nabla \times \mathbf{H}_0 = (\sigma - i\omega\varepsilon) \mathbf{E}_0 \quad (12)$$

したがって、式(5)、(7)、(11)、(12)から $\nabla \times \nabla \times$

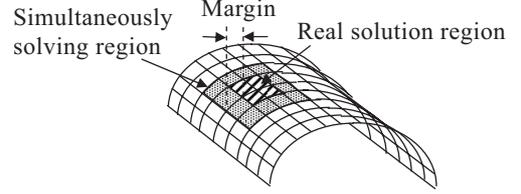


図2 局所境界要素法の計算要素.

$\mathbf{A} = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{A}) - \nabla^2 \mathbf{A}$ の関係を用いて、以下のヘルムホルツの方程式を得る.

$$\nabla^2 \mathbf{E}_0 + k^2 \mathbf{E}_0 = 0 \quad (13)$$

$$\nabla^2 \mathbf{H}_0 + k^2 \mathbf{H}_0 = 0 \quad (14)$$

ただし、 $k = \sqrt{\omega^2 \varepsilon \mu + i\omega \mu \sigma}$ は波数で、 k 、 \mathbf{E}_0 、 \mathbf{H}_0 はいずれも複素数である。 ϕ を電場または磁場の一成分とすると、式(13)、(14)はグリーン関数 G を含んだ以下の積分方程式に変換できる.

$$\phi(\mathbf{x}) = \int_s [G(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \phi^*(\mathbf{x}') - G^*(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \phi(\mathbf{x}')] ds(\mathbf{x}') \quad (15)$$

ただし、 s は点 \mathbf{x} を囲む閉局面を、 \mathbf{x}' は s 上の点を表し、 $*$ は s 上の法線方向の微分を表す。すなわち、 \mathbf{n} を s 上の法線ベクトルとすると、

$$\phi^* = \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{n}} \quad (16)$$

$$G^* = \frac{\partial G}{\partial \mathbf{n}} \quad (17)$$

また、 $r = |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|$ とすると、グリーン関数 G は二次元の場合 $H_0^{(2)}$ を第2種 Hankel 関数として

$$G(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \frac{i}{4} H_0^{(2)}(kr) \quad (18)$$

で表され、三次元の場合は以下の球面波の関数で表される.

$$G(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \frac{\exp(ikr)}{4\pi r} \quad (19)$$

物質境界にのみ離散化した電磁場要素を設けることにより、式(15)の積分方程式を解く⁴⁾。図2に局所境界要素法に用いるメッシュ、すなわち面要素の設定を示す。通常境界要素法では界面にのみ要素を設け、全要素間の相互作用を考慮して全要素上の電磁場を一括して求める。局所境界要素法では一括して電磁場を求める領域を限定し、限定された領域で領域内外の要素上の電磁場の影響を考慮しながら領域内の電磁場を一括して求める。一括計算領域の周辺部を除いて中央領域のみを正しい電磁場の解として採用し、順次上記の領域をシフトさせながら電磁場を求めることにより、全要素上の電磁場を求めることができる。一括計算領域を各界面内でシフトしながら最上層から最下層まで計算し、必要に応じて複数回の繰り返し計算を全層に対して行う。この方法を用いると、使用するメモリ空間

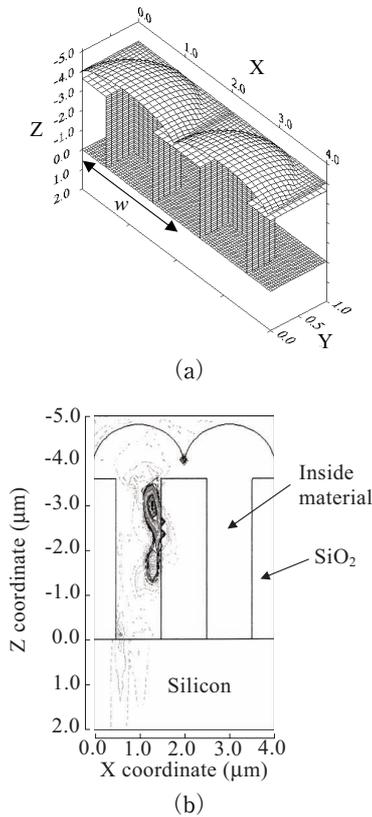


図3 クロストーク解析構造。(a) 鳥瞰図, (b) 断面図。

をきわめて小さくでき、従来の境界要素法に比べて計算時間を著しく小さくすることができるので、現在の計算機でも三次元の波動光学計算が十分実用的になる⁵⁾。

1.2 デバイス・シミュレーション

デバイス・シミュレーションは以下のポワソン方程式と電流連続式を基本としている⁶⁻⁸⁾。

$$\epsilon \nabla^2 \psi = -q(N_D - N_A + p - n) \quad (20)$$

$$\nabla \mathbf{J}_p + q \frac{\partial p}{\partial t} = qGR \quad (21)$$

$$\nabla \mathbf{J}_n - q \frac{\partial n}{\partial t} = -qGR \quad (22)$$

ψ は電位、 n は電子密度、 p はホール密度、 N_D はドナー濃度、 N_A はアクセプター濃度、 \mathbf{J}_n と \mathbf{J}_p はそれぞれ電子とホールの電流密度、 q は単位電荷、 GR は電荷生成再結合レートを表す。光学シミュレーションの結果をデバイス・シミュレーションで使用するために、 GR に対する光の寄与分 GR_{light} として以下の式を用いる。

$$GR_{\text{light}} = \frac{I\lambda\alpha}{hc} \quad (23)$$

ただし、 I は光強度 (単位面積、単位時間あたりのエネルギーの流れ)、 λ は入射光波長、 α はシリコンの光吸収率、 h はプランク定数、 c は真空中の光速を表す。

2. 解析例

光学・デバイス統合シミュレーションの解析例として、局所境界要素法による光導波路構造の集光率と光学クロストーク解析と、その結果を用いた CMOS イメージセンサーの統合クロストーク解析の例を示す。

2.1 局所境界要素法による光導波路構造の集光率と光学クロストーク解析

図3にクロストークの解析に用いた構造を示す。画素を2つ並べて、左側の画素のマイクロレンズのみに光を照射し、左右の画素の光感度領域に入射する光量の比でクロストーク量を定義した。導波路外側が SiO_2 (屈折率 1.45) で、セルサイズ w が 0.5, 1.0, および 2.0 μm のときに、クロストークと集光率の導波路内側物質屈折率依存性を求めた。

図4に、入射光波長 λ が 550 nm (実線) および 700 nm (破線) のときの、導波路外側物質が SiO_2 の場合のクロストークと集光率の導波路内側物質屈折率依存性を示す。光入射角 θ は 20 度とした。セルサイズ w が 1 μm 以上の場合、屈折率が 1.5 から 1.8 に増大するに従って、クロストークが急激に減少し、集光率が増大することがわかる。導波路外側物質が SiO_2 の場合、内側物質の屈折率としては 1.8 以上が望ましいと考えられる⁵⁾。

2.2 CMOS イメージセンサーの統合クロストーク解析

図5に、解析を行った CMOS イメージセンサーのセルのレイアウト図と等価回路を示す⁹⁾。セルサイズは 2 μm で、フォトダイオード部は暗電流と残像の低減のために、埋め込みフォトダイオード構造を採用している。セルは、P 基板上に 1 つの埋め込みフォトダイオードと、読み出し、リセット、選択、増幅の 4 つの MOS トランジスターから構成されている。読み出しゲートのゲート長は 0.3 μm 、そのほかのゲート長は 0.2 μm 、電源電圧は 3.3 V に設定した。シリコン基板の構造として、図3と同じ光導波路構造を想定し、導波路の内側物質の屈折率を 1.8、入射角 θ は 20 度とした。波長 400~700 nm の範囲で局所境界要素法を用いてシリコン内の光強度分布を計算し、式(23)を用いてデバイス・シミュレーターに取り込んで定常電流計算を行った。フォトダイオードの中心が光導波路の中心と一致するように、画素中心を X 方向に -0.5 μm ずらして X 方向に 2 画素並べて解析を行った。図6に XY 平面上の深さ方向最大電位分布を、図7に XZ 面上 ($Y=1 \mu\text{m}$) の生成再結合レートを示す。フォトダイオード中心付近の最大電位点に仮想電極を設け、左右 2 つの仮想電極に流れ込む電流の比を求めることにより、クロストークを計算した。図8にクロストークの波長依存性を示す。図8

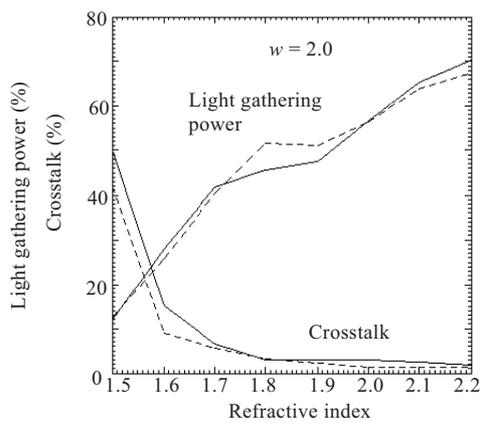
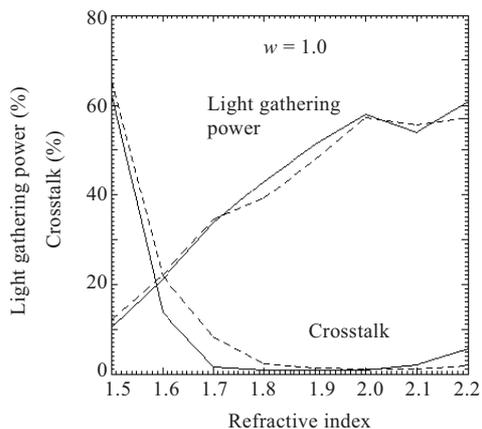
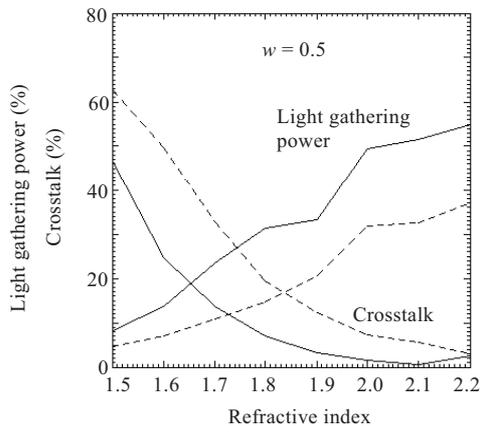


図4 クロストークと集光率の導波路内側物質屈折率依存性. (a) $w = 0.5 \mu\text{m}$, (b) $w = 1.0 \mu\text{m}$, (c) $w = 2.0 \mu\text{m}$.

から、光学的クロストーク（一点鎖線）の波長依存性は小さいにもかかわらず、光学的電気的統合クロストーク（実線）は波長とともにほぼ線形に増大することがわかる。これは、 $400\sim 700 \text{ nm}$ におけるシリコンの吸収係数は波長が長いほど小さいため、電気的クロストークがおもに基板深部で発生した長波長光による光電流の拡散によって生じていることが原因であると考えられる。このことは、N基板にP-wellを形成して画素構造を構成した場合のクロストーク

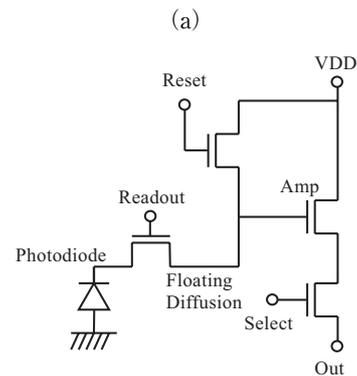
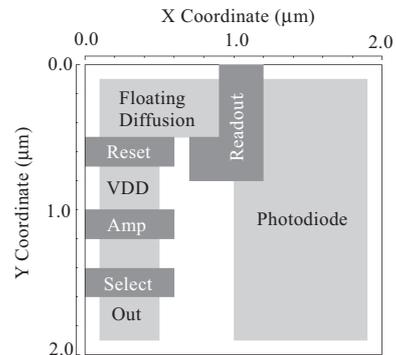


図5 解析に用いた CMOS イメージセンサー画素構造 ($w = 2.0 \mu\text{m}$). (a) マスク・レイアウト, (b) 等価回路.

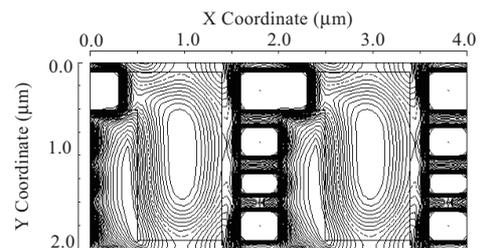


図6 X方向に2画素並べた構造のXY平面上深さ方向最大電位分布 ($0 \leq Z \leq 8 \mu\text{m}$).

ク（破線）が、P基板の場合と比べて長波長領域で著しく小さく、波長依存性が少ないことから裏付けられる。

3. 統合シミュレーションの課題と展望

これまで述べた光学・デバイス統合シミュレーションは、別々のモデル式を用いているため、電磁場シミュレーションとデバイス・シミュレーションの完全な統合にはなっていない。今後、イメージセンサーの動作速度が向上すると、ゲートの駆動パルスによる電場のシリコン基板内での伝搬遅延が問題となるため、真の意味での電磁場シミュレーションとデバイス・シミュレーションの統合、すなわち1つのモデル式による電磁場・デバイス統合シミュレーションが必要になる。筆者は最近、この統合に関して、きわめて深刻な問題が存在すること、ならびに有効な

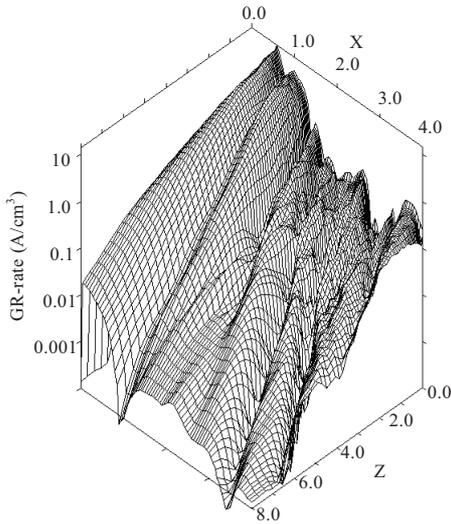


図7 XZ断面生成再結合レート ($Y = 1 \mu\text{m}$).

解決法が存在することを見いだした¹⁰⁾.

マクスウェル方程式は線形の微分方程式であり、重ね合わせの原理を満たす^{11,12)}ので、ホール電荷密度を $\rho_p \equiv qp$ とし、ホールの電流と電荷によって誘起される電場ベクトルと磁場ベクトルを \mathbf{E}_p と \mathbf{H}_p とすると、 \mathbf{J}_p , ρ_p , \mathbf{E}_p , \mathbf{H}_p について式(4)と式(5)が成り立たなければならない。すなわち、

$$\mathbf{J}_p = \nabla \times \mathbf{H}_p - \varepsilon \frac{\partial \mathbf{E}_p}{\partial t} \quad (24)$$

$$\rho_p = \varepsilon \nabla \cdot \mathbf{E}_p \quad (25)$$

式(24)と式(25)よりただちに

$$\nabla \cdot \mathbf{J}_p + \frac{\partial \rho_p}{\partial t} = 0 \quad (26)$$

が導かれるが、これは $GR \neq 0$ のとき式(21)と矛盾する。電子の場合も同様である。また、デバイス・シミュレーションにおける電極について考えると、シリコン基板中に点状の電極を設けて定常状態の電流を計算すると、電荷密度分布に時間変化がないため $\partial \rho / \partial t = 0$ が成り立つが、電極部分で電流の吸収または放出があるので $\nabla \cdot \mathbf{J} \neq 0$ となり、式(8)を満たさない。ゲート電極について考えると、時間に依存する電圧を印加するとき、電流はゼロだが電圧変化に応じてゲート電極表面の電荷量が変化するので、やはり式(8)を満たさない。

電荷の生成再結合問題の一例として、図9に示す光照射下の SiO_2 に囲まれたシリコン球について考える。シリコンは不純物のない真性半導体とし、光は球対称に全方向から照射され、球内の電子およびホール濃度は一様に分布すると仮定する。強い光を照射すると、シリコン内に電子・ホール対が生成されるが、光照射を止めると電子とホール

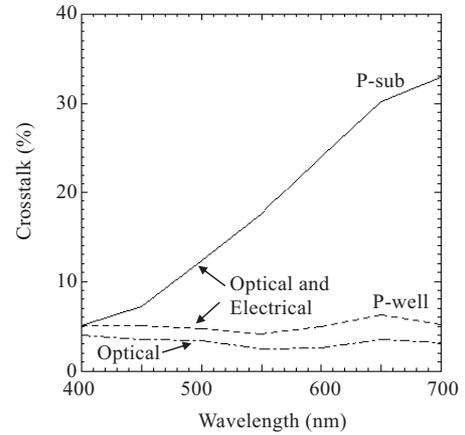


図8 クロストークの入射光波長依存性。実線：P型基板構造の統合クロストーク、破線：N型基板P-well構造の統合クロストーク、一点鎖線：光学的クロストーク。

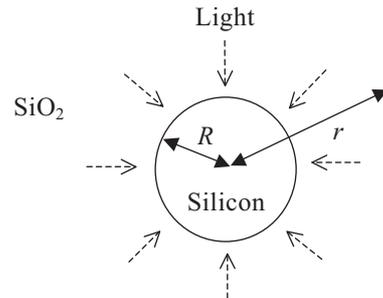


図9 全方向から光照射される SiO_2 中のシリコン球。

が再結合することが実験によって確かめられている。光照射を止めた時刻を $t = 0$ とし、この時点での電子とホールの電荷密度を ρ_0 とし、 τ を時定数とすると、 $t \ll \tau$ において、以下の関係が成り立つ。

$$\rho_p = \rho_0 \left(1 - \frac{t}{\tau} \right) \quad (27)$$

ガウスの定理から球座標を用いてホールによって誘起される球の外側の電場の動径成分を解くと、 ε_{ox} を SiO_2 の誘電率として

$$E_p(r) = \frac{4\pi R^3 \rho_p}{3 \cdot 4\pi \varepsilon_{\text{ox}} r^2} = \frac{R^3 \rho_p}{3 \varepsilon_{\text{ox}} r^2} \quad (28)$$

図9の構造は球対称なので磁場は存在せず¹²⁾、式(24)から球の外側のホール電流の動径成分を求めると

$$J_p(r) = -\varepsilon_{\text{ox}} \frac{\partial E_p}{\partial t} = \frac{R^3 \rho_0}{3r^2 \tau} \quad (29)$$

となって SiO_2 中にシリコン球から外側に向かってホール電流が放出されることになり、実験事実と反する結果を与える。

上記の問題を解決するために、電場、磁場に加えて新たに以下の式で定義されるスカラー場 γ を導入する。

$$\gamma = \nabla \mathbf{A} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (30)$$

ただし \mathbf{A} はベクトル・ポテンシャルを表す。□ を

$$\square \equiv \nabla^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \quad (31)$$

で定義されるダランベルシヤンとすると、 $\gamma = 0$ のローレンツ・ゲージの場合と同様、 $\gamma \neq 0$ の場合も以下の関係が成り立つと仮定する。

$$\mu \mathbf{J} = -\square \mathbf{A} \quad (32)$$

$$\rho = -\varepsilon \square \psi \quad (33)$$

すると式 (4) と式 (5) は以下のように書き換えられる。

$$\mathbf{J} = \nabla \times \mathbf{H} - \varepsilon \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} - \frac{1}{\mu} \nabla \gamma \quad (34)$$

$$\rho = \varepsilon \nabla \mathbf{E} + \varepsilon \frac{\partial \gamma}{\partial t} \quad (35)$$

式 (34) と式 (35) から qGR を求めると、

$$qGR = \nabla \mathbf{J} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{1}{\mu} \square \gamma \quad (36)$$

となって、 γ の存在により、式 (21) および式 (22) を満たすことができる。新しい電磁場の方程式 (6), (7), (34), (35) は $\mathbf{J}, \rho, \mathbf{E}, \mathbf{H}$ についてマクスウェル方程式と同じローレンツ共変性を満たし、 GR, γ および □ はローレンツ変換に対して不変である。 $\mathbf{E}, \mathbf{H}, \gamma$ は □ $\chi = 0$ を満たすスカラー関数 χ に関して $\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla \chi$, $\psi' = \psi - \partial \chi / \partial t$ のゲージ変換に対して不変性をもつ。また、これらの方程式は Fermi によって提案され、現在は一般に認められている量子電磁力学における電磁場のラグランジアン密度^{13,14)}と同じラグランジアン密度を与える。

FDTD 法のアルゴリズムを用いて上記の電磁場のモデルを三次元デバイス・シミュレーター SPECTRA¹⁵⁾ に組み込んで CMOS イメージセンサーについて計算を行った結果、電磁場の伝搬に伴う電位変動によって生じるノイズが基板を薄くすることによって低減される等、これまでのシミュレーションでは得られなかった興味深い解析結果が得られた^{16,17)}。今後、上記の電磁場とデバイス・シミュレ-

ションの統合モデルを用いてイメージセンサーに関するさまざまな問題の解析を進めるとともに、この方法が広く利用されることを期待する。

文 献

- 1) 石黒浩三：光学 (共立全書, 1977) pp. 26-32.
- 2) 宇野 亨：FDTD 法による電磁界およびアンテナ解析 (コロナ社, 1988) pp. 1-32.
- 3) A. Taflov: *Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method* (Artech House, Norwood, MA, 1995).
- 4) 田中正隆, 田中道彦：境界要素解析の基礎 (培風館, 1984) pp. 149-165.
- 5) H. Mutoh and S. Sugawa: "Three-dimensional wave optical simulation for image sensors by localized boundary element method," *IEEE Trans. Electron Devices*, **56** (2009) 2473-2480.
- 6) 檀 良：プロセス・デバイス・シミュレーション技術 (産業図書, 1988) pp. 91-106.
- 7) S. M. Sze: *Physics of Semiconductor Devices*, 2nd ed. (Wiley, New York, 1981) pp. 50-51.
- 8) S. Selberherr: *Analysis and Simulation of Semiconductor Devices* (Springer, Wien, 1984) pp. 8-11.
- 9) H. Mutoh: "3-D optical and electrical simulation for CMOS image sensors," *IEEE Trans. Electron Devices*, **50** (2003) 19-25.
- 10) H. Mutoh: "Physical models and algorithms for device simulation for high-speed image sensors," 映像情報メディア学会誌, **67** (2013) J89-J94. (https://www.jstage.jst.go.jp/article/itej/67/3/67_J89/_pdf)
- 11) 平川浩正：電気力学 (培風館, 1973) pp. 1-19.
- 12) R. P. Feynman, R. B. Leighton and M. L. Sands: *Feynman Lectures on Physics*, 2 (Addison-Wesley, Massachusetts, 1965).
- 13) S. S. Schweber: *An Introduction to Relativistic Quantum Field Theory* (Harper & Row, New York, 1962) p. 242.
- 14) 横山寛一：量子電磁力学 (岩波書店, 1978) p. 15.
- 15) H. Mutoh: "Simulation for 3-dimensional optical and electrical analysis of CCD," *IEEE Trans. Electron Devices*, **44** (1997) 1604-1610.
- 16) 武藤秀樹："高速半導体素子のためのデバイス・シミュレーションの物理モデル", 第 60 回応用物理学会春季学術講演会予稿集 (2013) 28p-G7-6.
- 17) H. Mutoh: "Device simulation with electromagnetic field propagation models for high-speed image sensors and FDA noise analysis," *Proceeding of 2013 International Image Sensor Workshop*, Session 07, 07.01 (2013) pp. 189-192. (<https://www.imagesensors.org>)

(2013 年 2 月 21 日受理)