

SiC/SiO₂ 界面構造と電子特性の相関解明

Clarification of the relationship between SiC/SiO₂ interface structures and electronic properties

松下雄一郎

東京工業大学 科学技術創成研究院 フロンティア材料研究所

1. 研究目的

持続可能な社会の実現に向け、その要となる電子デバイスの1つがパワーデバイスである。パワーデバイスは電力変換に不可欠な電子デバイスであり、低電力ロスなパワーデバイスが現在求められている。中でも、次世代パワーデバイス半導体として近年大きな注目を集めているのが、SiC、 α -Ga₂O₃である。本研究では、SiC、 α -Ga₂O₃をターゲットに、界面ひずみや点欠陥と、電子状態の相関関係の解明を行なうことを目的とした。

2. 研究成果の内容

本年度は、実験との学際共同研究により、以下の大きく3つの成果を得ることが出来た。

- (1) SiC/SiO₂ 界面近傍における残留炭素欠陥の安定性解明
- (2) SiC/SiO₂ 界面に存在する炭素ダングリングボンド(Pbc センタ)の構造同定
- (3) α -Ga₂O₃ 中の点欠陥の構造安定性とその電子状態解明

各項目の詳細な成果は以下の通りである。

- (1) SiC/SiO₂ 界面近傍には、残留炭素欠陥が存在することが SIMS (Secondary Ion Mass Spectroscopy) 実験により明らかとなっている。本研究では、界面近傍の残留炭素欠陥の構造安定性を、SiO₂ 側、SiC 側、SiC/SiO₂ ジャスト界面の3つの領域で温度と酸素分圧の関数として調べた。その結果、SiC/SiO₂ ジャスト界面領域における炭素クラスタが安定な構造であることを見出した。また、高温・低酸素分圧の環境下において炭素クラスタが比較的不安定化することがわかった。このことから、高温・低酸素分圧下における熱酸化がより好ましいことを見出した。また、この計算結果は、実際の実験とも整合していることを見出した。
- (2) SiC/SiO₂ 界面において EDMR (Electrically Detected Magnetic Resonance) 測定によって炭素ダングリングボンド(Pbc センタ)の存在が実験的に観測された。しかし、その微視的構造までは未解明であった。本研究では、DFT 計算により、その微視的構造を界面に存在する炭素アトムであることを解明した。本研究成果は、理論と実

験との学際融合によって、SiC/SiO₂ 界面欠陥をその微視的構造まで含めて初めて完全解明に成功した例である。

- (3) SiC の次の次世代パワーデバイス半導体として大きな注目を集める α -Ga₂O₃ において、そのバルク中の点欠陥の安定性を DFT 計算により解明した。その結果、フェルミエネルギーを価電子帯に近づける (p 型化) させると、点欠陥の生成エネルギーが負となり、自発的に点欠陥が生成されることを明らかにした。このことは、p 型 α -Ga₂O₃ の実現が難しいことを意味している。

3. 学際共同利用が果たした役割と意義

SiC/SiO₂ 界面における界面欠陥の構造同定は、SiC デバイス開発において重要な知見を与えるため、様々な理論的・実験的研究活動がなされてきた。その一方で、SiC/SiO₂ 界面欠陥の完全同定には至ってこなかった。本年度の理論と実験との共同研究により、初めて SiC/SiO₂ 界面欠陥の 1 つの構造同定に成功した。これは SiC のパワーデバイス実現に向けて重要な知見となる。本計算において、学際共同利用を使用させていただき、スピーディーな欠陥構造同定に役立った。

4. 今後の展望

これまでに得られた理論的知見を生かし、SiC/SiO₂ 界面の界面準位低減法を理論的に提案し、学際共同研究により実験的に実証する。

5. 成果発表

(1) 学術論文

[1] “Structure and energetics of carbon defects in SiC(0001)/SiO₂ systems at realistic temperatures: Defects in SiC, SiO₂, and at their interface” T. Kobayashi and Y. Matsushita, *Journal of Applied Physics*, **126**, 145302 (2019).

[2] “Carbon dangling-bond center (carbon Pb center) at 4H-SiC(0001)/SiO₂ interface” T. Umeda, T. Kobayashi, M. Sometani, H. Yano, Y. Matsushita, S. Harada, *Applied Physics Letters* **116**, 071604 (2020).

[3] “Energetics and electronic structure of native point defects in α -Ga₂O₃” T. Kobayashi, T. Gake, Y. Kumagai, F. Oba, and Y. Matsushita, *Applied Physics Express* **12**, 091001 (2019).

(2) 学会発表

“Ab-initio study on 4H-SiC(0-33-8)/SiO₂ interface structures and its electronic structures” Y. Matsushita and T. Hatakeyama, *International Conference on Silicon Carbide and Related Materials 2019 (Kyoto)*. 国際学会

(3) その他

特許 2019-140141 “炭化ケイ素半導体装置及びその製造方法” 松下雄一郎 (2019).

使用計算機	使用計算機 に○	配分リソース*	
		当初配分	追加配分
Cygnus			
Oakforest-PACS	○	225000	0
※配分リソースについてはノード時間積をご記入ください。			