

SiC/SiO₂ 界面に現れる構造と電子物性の関係解明

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

SDGs が叫ばれる昨今、パワーデバイスは SDGs 実現に向けて重要な位置を占める。現在はシリコンパワーデバイスが主として用いられているが、シリコン材料に由来するデバイスの性能限界に直面している。SiC（炭化ケイ素）はその優れた物性から、ポストシリコンパワーデバイスとして大きな注目を集めており、特に SiC-MOS デバイスでは多くの理論的実験的研究がなされてきた。しかし、依然、SiC-MOS において SiC/SiO₂ 界面に存在する高密度界面欠陥により、そのデバイス性能は理論性能値と比べてせいぜい 10%程度でしかなく、更なるデバイス性能向上には界面欠陥の微視的構造特定とその低減法の提案が不可欠となっている。本研究では、SiC/SiO₂ 界面における界面欠陥の微視的正体を解明すること、さらにはその界面欠陥密度の低減法の提案を行う。

2. 研究成果の内容

第一原理計算に基づいた理論計算により、SiC/SiO₂ 界面には大量の残留炭素欠陥が析出することがわかった。網羅的な炭素欠陥の安定性計算により、界面における炭素欠陥が安定であることがわかった。このことは、SiC 上に酸化膜を形成する際、炭素欠陥が不可避に析出することを意味する。つまり、界面炭素欠陥を低減する為には、従来の熱酸化による酸化膜形成法では問題であることを示している。そこで、我々は新しい酸化膜形成法を理論の観点から提案した。SiC 基板上にシリコン膜を堆積させ、700°C というシリコン膜のみ（SiC 基板は酸化されない）が酸化される温度で熱酸化を行う。そうすることにより、SiC 基板を熱酸化せずに酸化膜を成長させる方法を考えた。新しい酸化膜作成法はすぐに実験的に確認され、界面欠陥密度が従来法の 10 分の 1 であることを見出した。

3. 学際共同利用が果たした役割と意義

実験では正体が暴くことが難しかった界面欠陥の微視的構造を第一原理計算から明らかにすることに成功した。また、その結果から、それを提言する方法を理論的に提案し、実験によってその有効性を証明することに成功した。理論計算と実験との協力的なタッグによって初めて実現し得た成果であり、学際共同利用の有効性が明らかとなった成果である。

4. 成果発表

(1) 学術論文

“Design and formation of SiC(0001)/SiO₂ interfaces via Si deposition followed by low-temperature oxidation and high-temperature nitridation” Takuma Kobayashi, Takafumi Okuda, Keita Tachiki, Koji Ito, Yu-ichiro Matsushita, and Tsunenobu Kimoto, *Applied Physics Express* **13**, 091003/1-4 (2020).

(2) 学会発表

[1] (Keynote talk) “An-intio studies on SiC/SiO₂: identification of interface states and a theoretical approach to reduce the interface-state density” Yu-ichiro Matsushita, *International Symposium on Wide Gap Semiconductor Growth, Process and Device Simulation 2021, Online* (2021).

[2] (Invited speaker) “Theoretical study for Reduction of Interface State Density in SiC-MOSFETs” Yu-ichiro Matsushita, *International Meeting on Thin Film Interfaces and Composite Crystals, Okayama* (2021).

(3) その他

「SiC-MOS デバイスのコストを数分の 1 にする新しい SiC/SiO₂ 界面作成法の提案」、プレス発表

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	○		
※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。			