

SiC/SiO₂ 界面構造と電子物性の相関解明

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

松下 雄一郎

東京工業大学 フロンティア材料研究所

1. 研究目的

炭化ケイ素(SiC)は次世代のパワー半導体として大きな注目を集めている。また、SiCは自然酸化膜としてSiO₂膜を形成することが出来る点も、自然酸化膜をそのままMOSデバイスに利用することができることから、優れた物性の1つとなっている。しかし、一方で、SiC/SiO₂界面にはSi/SiO₂界面と比べて千倍も高い界面準位密度のために、そのデバイス特性は理論特性から程遠いのが現状である。現在、理論や実験による界面準位の微視的同定が進められているが、未だにその解決には至っていない。現状、界面準位の有力な候補と考えられているのは界面に残留した炭素関連欠陥であり、実際に界面残留炭素がSIMSなどの実験において測定にかかっているが、その欠陥構造特定には至っていない。

2. 研究成果の内容

本研究では、密度汎関数理論に立脚した理論計算により、界面炭素欠陥のエネルギー安定性を明らかにした。具体的に、SiO₂側・SiC側・ジャストSiC/SiO₂界面の3つの領域において考え得る炭素関連欠陥の構造を全て作成し、その形成エネルギーを計算した。特に、SiO₂中の炭素関連欠陥においては、網羅的な欠陥構造の探索を実現すべく、RSDFT/RSCPMOプログラムコードを用いたメルト-クエンチ法により安定な準安定構造を絞り込んだ。

その結果、炭素関連欠陥の多くはジャストSiC/SiO₂界面領域に存在することがわかった。次いで、SiC側にも多くが安定に存在していることが計算により示すことができた。また、欠陥の構造安定性に関して、(実験においても操作することのできる)温度と酸素分圧依存性を計算によって調べたところ、高温低圧環境下では界面欠陥の形成エネルギーが上がり、より不安定化する傾向があることがわかった。このことは、最近の実験事実とも定性的に整合することがわかった。

また、得られた計算結果において見出された特徴的な欠陥の1つとして、ジャスト界面における炭素ダングリリングポンド(Pbcセンター)が見出された。Pbcセンターは、ごく最近、電子スピン共鳴(ESR)測定で発見された欠陥構造であり、その実験とも整合することがわかった。

3. 学際共同利用として実施した意義

今回の理論計算結果は SiC-MOS デバイスの開発にとって重要な知見であり、激化する世界的な研究開発の中で先頭を進むには、スピーディーに研究を進めていく必要がある。そのため、本研究では実験と共同で研究を進めており、お互いにフィードバックをかけながら進めている。実際に、本研究の計算結果はすぐさま実験へと渡し、実験からのフィードバックをもらいながら進めてきた。その結果、世界初の Pbc センターの生成機構解明につながっている。これは強いては、SiC-MOS デバイス開発への多大な貢献につながっている。

4. 今後の展望

SiC-MOS デバイスにおける界面準位欠陥の低減に取り組む。酸化膜の成長条件や、成長方法を理論と実験との協カタッグで挑むことにより、界面準位低減の方法を提案する。

5. 成果発表

(1) 学術論文

[1] “Structural stability and energy levels of carbon-related defects in amorphous SiO₂ and its interface with SiC” Yu-ichiro Matsushita and Atsushi Oshiyama, Japanese Journal of Applied Physics **57**, 125701/1-5 (2018).

[2] “Structural determination of phosphosilicate glass based on first-principles molecular dynamics calculation” Takuma Kobayashi, Yu-ichiro Matsushita, Tsunenobu Kimoto, and Atsushi Oshiyama, Japanese Journal of Applied Physics **58**, 011001/1-4 (2018).

[3] “Native point defects and carbon clusters in 4H-SiC: A hybrid functional study” Takuma, Kobayashi, Kou Harada, Yu Kumagai, Fumiyasu Oba, and Yu-ichiro Matsushita, Journal of Applied Physics **125**, 125701/1-8 (2019).

(2) 学会発表

[1] “第一原理計算による SiC 酸化膜界面の伝導帯端の揺らぎ -SiC MOS 界面の構造特定に向けて” 松下雄一郎、先進パワー半導体分科会第 12 回研究会、東京 (2018)

[2] “第一原理計算による SiC/SiO₂ 界面近傍の炭素関連欠陥の構造同定” 小林拓真、松下雄一郎、応用物理学会、東京 (2019).

[3] “りん処理による SiC/SiO₂ 界面の炭素関連欠陥の低減機構” 小林拓真、松下雄一郎、奥田貴史、木本恒暢、押山淳、応用物理学会、東京 (2019).

[4] “SiC 酸化膜中の窒素関連欠陥の構造とその電子状態” 松下雄一郎、小林拓真、応用物

理学会、東京 (2019).

(3) その他

| 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 |
| COMA | ○ | 2283 | 0 |
| 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。 | | | |