

炭化ケイ素 (SiC) 半導体の熱酸化シミュレーション

背景

SiC半導体を適用したパワーエレクトロニクス機器は、低損失化によるエネルギー消費の低減、高電圧化による小型化など、Si系半導体素子を適用した同機器に比較し、大幅な高性能化が期待できる。SiC半導体はSi半導体と同様に熱酸化により酸化絶縁膜を作製出来るため、次世代のMOS型パワーデバイス (Metal Oxide Semiconductor) (図1) として有望である。しかしこれまで試作されたSiC MOS型パワーデバイスは、界面トラップの存在等によりチャンネル移動度が理論的な予想値より2桁小さく、その優れた特性を発揮できていないのが現状である。SiC MOS型パワーデバイスの特性改善のためには、SiC熱酸化過程における界面トラップの生成メカニズムを明らかにすることが重要である。

目的

SiC熱酸化膜界面の界面トラップの起源を明らかにするため、第一原理分子動力学法^{*1}により熱酸化過程を解明する。

主な成果

世界最速級のスーパーコンピュータである地球シミュレータを用い、温度2500Kにおいて二酸化ケイ素 (SiO₂)/4H-SiC^{*2}界面における一連の酸化過程の動的シミュレーションを世界で初めて行い、以下の成果を得た。

1. SiO₂/SiC界面における酸素分子の解離反応

SiCの熱酸化過程において、酸素分子はSiO₂層を拡散して界面に到達することにより解離反応を行うと考えられているため、酸素分子が界面付近のSiO₂層中に拡散した後の熱酸化反応の動的シミュレーションを行った。酸化反応のきっかけとしてSiC界面近傍に炭素空孔を導入した界面モデルにおいて、追加した酸素分子はSiO₂層中のSi原子と結合し、中間状態を経て解離した (図2)。これにより従来考えられているように、酸素分子が直接SiC層と反応する酸化反応過程以外に、SiO₂層中のSi原子と反応する反応過程が起きていることが明らかになった。

2. CO分子、C₂O分子、炭素クラスタ生成

酸化過程のシミュレーションにおいて、CO分子およびC₂O分子の生成が観測された。また、SiO₂/SiC界面における界面トラップの候補の一つと考えられている炭素クラスタ^{*3}が、酸化過程の途中で生成されていることが明らかとなった (図3)。

*本研究は独立行政法人 日本原子力研究開発機構との共同研究により執り行われた。

今後の展開

本シミュレーション手法である第一原理分子動力学計算を用いて、SiO₂/SiC界面の熱酸化過程を総合的に解明する。

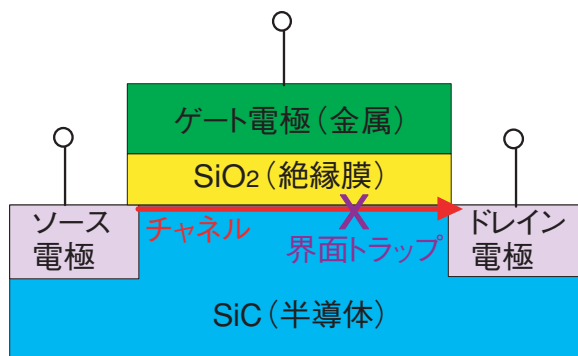
主担当者 材料科学研究所 構造材料評価領域 主任研究員 大沼 敏治

関連報告書 電力中央研究所研究報告「第一原理計算によるSiC熱酸化シミュレーション手法の開発」：Q05016 (2006年6月) “Dynamical simulation of SiO₂/4H-SiC (0001) interface oxidation process: from first-principles”, Materials Science Forum 556-557 (2007) 615-620 (Invited Paper)

*1：原子スケールのシミュレーション手法の一つで量子力学に基づき原子間に働く力を計算する。化学反応など結合が変わる現象にも適用可能だが計算量が膨大という短所がある。

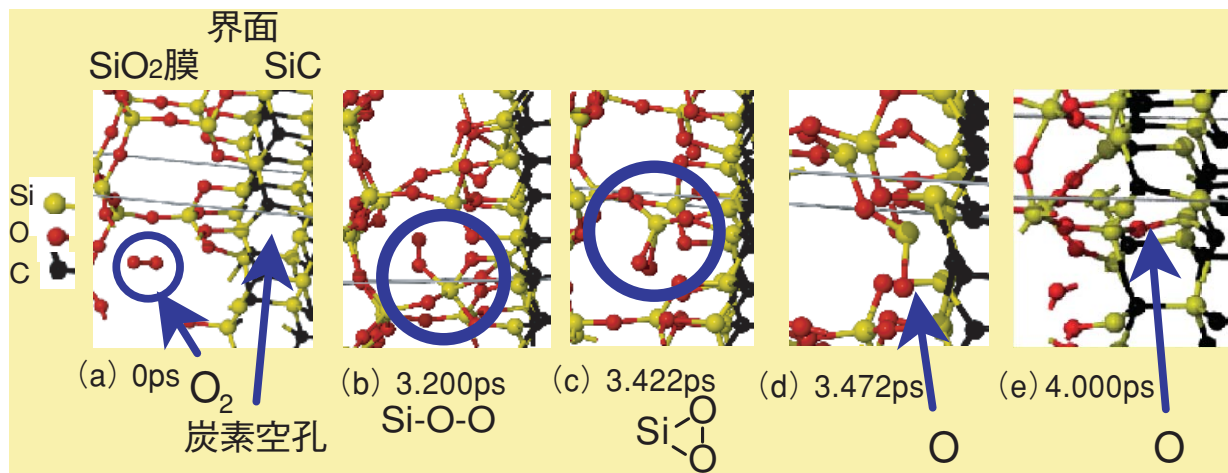
*2：SiCは様々な結晶構造を持ち対称性により3C、4H、6Hなどがある。パワーデバイスとして4H-SiCが現在最も広く研究されている。

*3：SiCの中において炭素はSiと結合しているが、炭素同士で結合して集まった (クラスタ化) したものの。



MOS構造はSiCを熱酸化しSiO₂を形成した後、電極をつけることにより作製する。ゲート電極と半導体（SiC）の間に電圧を印加すると、半導体と絶縁膜の間にチャンネルという電子の流れやすい層が現れるが、界面トラップが存在する場合には電子が流れにくくなる。

図1 MOS（Metal Oxide Semiconductor）デバイスの構造



(a) 0ps (ps: 10⁻¹²秒) で酸素分子を追加。(b) 3.200ps後、SiO₂層中のSi原子に酸素分子が結合、5配位になる。(c) 3.422ps後、Si-O-Oは三角形の配置となる。(d) 3.472ps後、界面酸素原子がSiC層に向かって移動を開始。(e) 4.000ps後、界面酸素原子は炭素空孔の位置へ移動し、酸素分子の解離反応が終了。

図2 SiCの熱酸化過程における酸素分子の解離反応

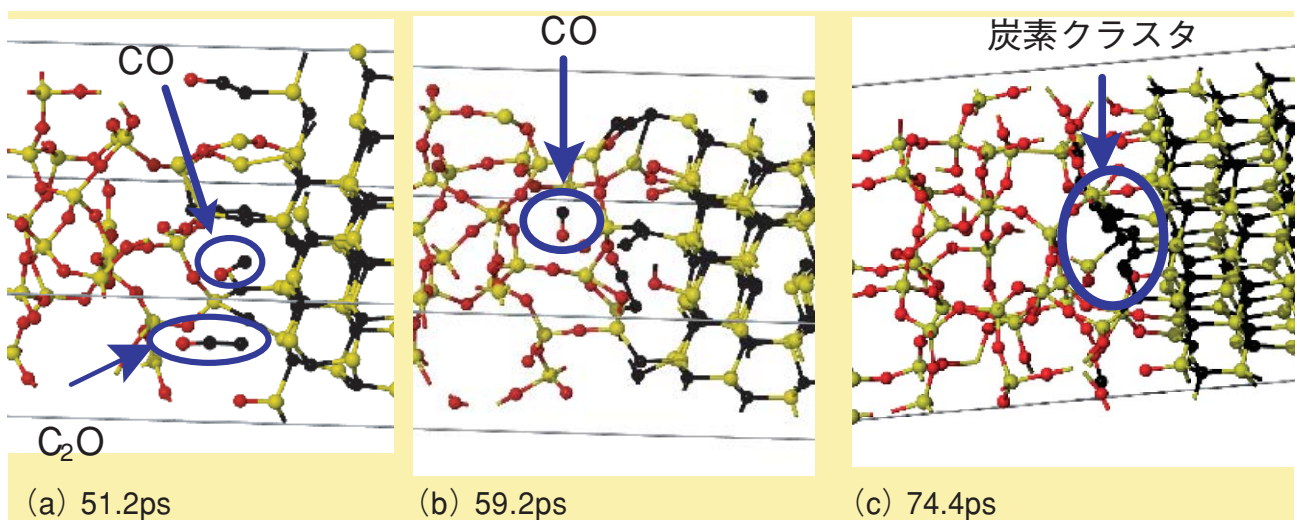


図3 CO分子、C₂O分子、炭素クラスタの生成

(a) 51.2ps後、CO分子、C₂O分子の生成。(b) 59.2ps後、CO分子の生成。(c) 74.4ps後、界面SiCの1層目のSi原子層の酸化と炭素クラスタの生成。