

シミュレーションを活用した SiC デバイスの原子レベルの解析

Atomic Level Analysis of SiC Devices Using Numerical Simulation

広瀬 隆之 HIROSE, Takayuki

森 大輔 MORI, Daisuke

寺尾 豊 TERAO, Yutaka

パワーエレクトロニクス機器の低損失化の必要性が高まっており、ワイドバンドギャップ半導体の SiC（炭化けい素）を使用したパワー半導体デバイスの研究開発が活発に行われている。SiC-MOSFET の電気特性は、ゲート酸化膜界面での原子レベルの乱れに起因した電荷トラップに影響される。その起源を解析するため、X 線光電子分光法による分析や第一原理計算によるシミュレーションを用いて原子レベルの解析を行った。これにより、ゲート酸化膜界面での Si の化学状態や、界面に窒素を導入した場合の窒素による終端構造を推定することができた。

Research and development of power semiconductor devices with SiC (silicon carbide) has been very active because of the increasing need for low-loss power electronics equipment. The electrical properties of the SiC-metal-oxide-semiconductor field-effect transistors (SiC-MOSFETs) are affected by charge trapping that is thought to be caused by the atomic level disorder at the interface between the gate oxide and SiC (SiC/SiO₂ interface). In order to analyze the origin of the disorder at the interface, we have been implementing the atomic level analysis using both the X-ray photoelectron spectroscopy and the simulation based on the first principles calculations. As a result, we were able to estimate the chemical state of Si at SiC/SiO₂ interface, as well as its terminated structure via nitrogen when the interface is nitrated.

1 まえがき

近年、低炭素社会を実現するために、パワーエレクトロニクス（パワエレ）機器の低損失化の必要性が高まっている。富士電機では、無停電電源装置（UPS）や各種電動力応用機器、交通・流通インフラ向けに数多くのパワエレ機器を製品化してきた。これらのパワエレ機器を飛躍的に低損失化するためには、パワー半導体デバイスや回路、制御などの技術革新によるインバータの高効率化が重要となる。現在、パワー半導体デバイスの材料として主流である Si（シリコン）に代わる次世代半導体として、SiC（炭化けい素）や GaN（窒化ガリウム）などのワイドバンドギャップ半導体が注目され、これらを使用したパワー半導体デバイスの研究・開発が活発に行われている。

富士電機は、SiC-SBD（Schottky Barrier Diode）を既に製品化し、現在、SiC-MOSFET（Metal-Oxide-Semiconductor Field-Effect Transistor）を開発している。この SiC-MOSFET の低損失化のためには、移動度といった電気特性の向上が重要になる。電気特性の支配要因として、ゲート酸化膜（SiO₂）界面の原子レベルの乱れに起因する電荷トラップの存在が考えられる。したがって、電気特性を向上するためには、この電荷トラップの実体を明らかにすることが重要である。

本稿では、電荷トラップの実体を推定するための解析技術として、機器分析に加えてシミュレーション手法として第一原理計算を組み合わせた SiC デバイスの原子レベルの解析技術について述べる。

2 SiC-MOSFET

SiC-MOSFET のデバイス構造の概略を図 1 に示す。

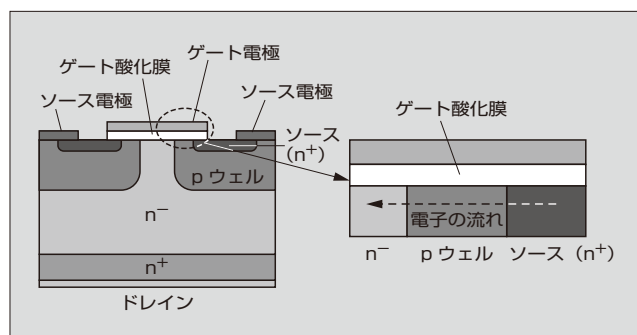


図 1 SiC-MOSFET のデバイス構造の概略

MOSFET では、ゲート電極に電圧を印加してゲート電極と SiC 基板の界面にある p ウェル層に反転層を形成し、ソースドレイン間に電圧を印加することでチャンネルに電子が流れる。

MOSFET で重要な特性には、オン抵抗に影響する移動度と MOSFET がオンするしきい値電圧 V_{th} がある。移動度を高くできればオン抵抗が減少できるので、MOSFET を使用する機器の消費電力が低減できる。

SiC-MOSFET の移動度特性の例を図 2 に示す。横軸はゲート電圧 V_g である。プロセスによって移動度の大きさや V_{th} が異なっていることが分かる。この違いは、SiO₂ 界面の原子レベルの乱れに起因する電荷トラップの存在によるものと考えられる。この電荷トラップによって、クーロン散乱による移動度の低下や V_{th} の変動が起これると考えられる。したがって、低オン抵抗化や V_{th} の変動抑制による信頼性の向上には、原子レベルでの乱れの低減が重要となる。

原子レベルの乱れの指標として界面準位密度がある。

〈注 1〉クーロン散乱：58 ページ「解説 2」を参照のこと

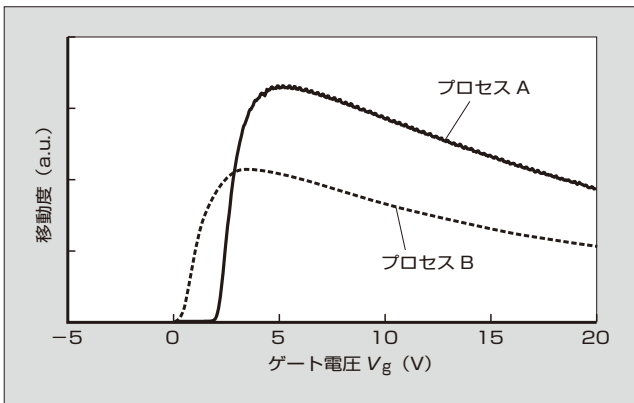


図2 SiC-MOSFET の移動度特性の例

SiC 基板には Si 面や C 面などの結晶面の異なる基板があり、それによって界面準位密度が異なる。例えば、Dhar らによると、ドライ酸化で酸化膜を形成した場合は、Si 面の界面準位密度は C 面の場合より低いことが報告されている⁽¹⁾。また、界面への窒素の導入によって界面準位密度が低減することが報告されている^{(1)~(3)}。このように、面方位の種類やプロセスによって界面特性が異なっている。

このような原子レベルの乱れに起因すると考えられる界面準位密度を低減するためには、その界面準位の実体（化学状態や分子構造・配列）を理解する必要がある。このため、富士電機では SiC/SiO₂ 界面の原子レベルでの分析・解析に取り組んでいる。例えば、SiO₂ 界面の様子を透過電子顕微鏡で観察したり、界面における Si 原子などの化学状態と分子構造を評価するために放射光施設を利用した X 線光電子分光法（XPS：X-ray Photoelectron Spectroscopy）による評価を行ったりしている⁽⁴⁾。さらに、分析結果から得られた分子構造と電気特性の関係を推定するために、後述する第一原理計算を取り入れた解析を行っている。特に、SiC は Si とは異なり化合物であるため、界面準位の実体を把握することが難しいが、第一原理計算を取り入れた解析によって分子構造や界面準位を推定することが可能と考えられる。

3 XPS による分析

3.1 放射光 XPS

ここでは、放射光施設を利用した XPS を用いて SiC/SiO₂ 界面を評価した結果について述べる⁽⁴⁾。

XPS は、試料の表面から深さ数 nm における原子情報を得る手法であり、原子の化学状態を定量的に評価することができる。

この分析手法を用いて、酸素雰囲気中で形成（ドライ酸化）あるいは N₂O 雰囲気中で形成（N₂O 酸化）した酸化膜と SiC との界面の化学状態を解析した。SiC 基板には、Si 面と C 面を用いた。

界面を構成するごく微量の原子の情報を得るため、測定は酸化膜の膜厚を 1.5 nm 程度に薄くした試料を用いて放射光施設（SPring-8 BL27SU）にて実施した^(注2)。

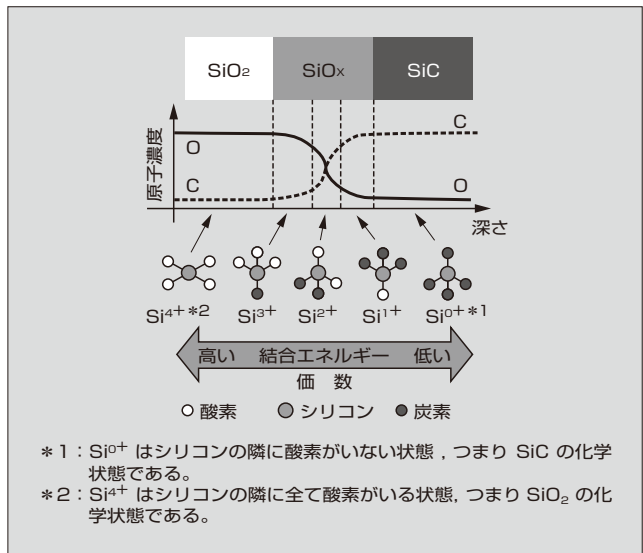


図3 SiC/SiO₂ 界面の模式図

図3に SiC/SiO₂ 界面の模式図を示す。SiO_x は界面における Si の酸化状態が変化している領域を指す。その領域では、Si の周りに結合している酸素の個数が異なる化学状態が連続的に存在していると考えられる。Si の化学状態の成分として、SiC 基板、SiO₂ 成分の他に 3 種類のサブオキサイド成分（Si¹⁺、Si²⁺、Si³⁺）とし、これらの成分を抽出するため、XPS で得られたスペクトルについて波形分離を行った。

3.2 Si スペクトルの解析

図4に N₂O 酸化 SiC/SiO₂ 界面の Si のスペクトルを示す⁽⁴⁾。各サブオキサイド成分の量を比較した結果、C 面、Si 面と

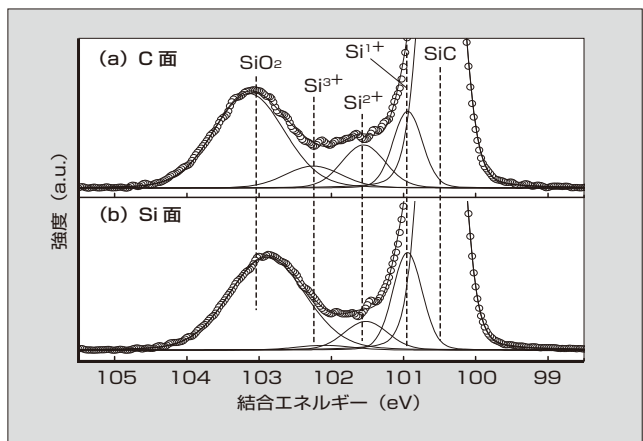


図4 N₂O 酸化 SiC/SiO₂ 界面の Si のスペクトル

〈注2〉 SPring-8：国立研究開発法人 理化学研究所が、施設者として包括的運営を行う世界最高性能の放射光を生み出すことができる大型放射光施設である。材料科学、地球科学、生命科学、環境科学、医学などの広い分野への活用が期待されている。

〈注3〉 数字が大きいくほど、Si 原子の周りに存在する酸素原子数が多い。

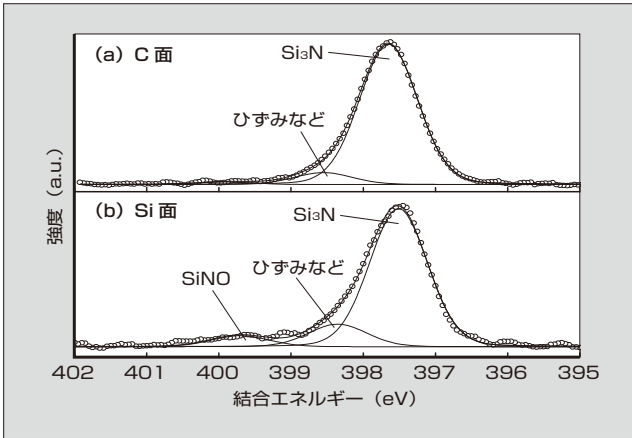


図5 N₂O 酸化 SiC/SiO₂ 界面の窒素のスペクトル

もに Si¹⁺ 成分が最も多かった。Si³⁺ 成分の量は、Si 面に比べ C 面は約 4 倍多かった。

図示していないが、ドライ酸化のサブオキサイド成分の傾向は、N₂O 酸化とほぼ同様の結果であった。

3.3 N₂O 酸化の窒素スペクトルの解析

図 5 に N₂O 酸化界面の窒素のスペクトルを示す⁽⁴⁾。主成分は、そのピーク位置から C 面、Si 面ともに三配位 Si₃N に帰属できる⁽⁷⁾。さらに、C 面、Si 面ともに窒素のスペクトルの高エネルギー側にショルダーが観察された。このショルダーは Si₃N のひずみや、CN、NO_x などの Si₃N 以外の化学状態に帰属される⁽⁷⁾。

4 第一原理計算による解析

XPS 分析で得られた C 面と Si 面の差異を解析し、SiC/SiO₂ 界面の分子構造を推定するため、第一原理計算を用いて SiC/SiO₂ 界面の理想的な分子構造を仮定し、XPS 分析の結果と対比することで、界面分子構造を解析した。

第一原理計算とは、もっとも基本的な原理に基づく計算という意味であり、原子レベルやナノスケールレベルで量子力学に基づき、物質中の電子の状態を数値計算により解く手法である。第一原理計算によって、未知の物質の性質や、実験では測定できない原子レベルの物理・化学的現象を調べることができる。

本稿で紹介する第一原理計算には、DMol³⁽⁸⁾⁽⁹⁾を用いた。

4.1 界面分子構造の解析

(1) ドライ酸化

ドライ酸化した場合の界面解析の出発点として、SiC/SiO₂ 界面の急峻（きゅうしゅん）な理想界面構造のモデルを作成した。図 6 に示すように、SiC の結晶構造から C

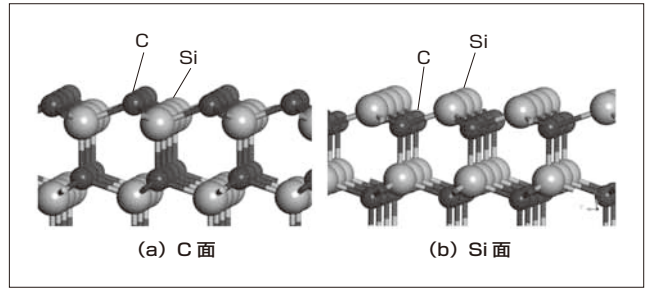


図6 SiC 結晶構造から作成した表面構造のモデル

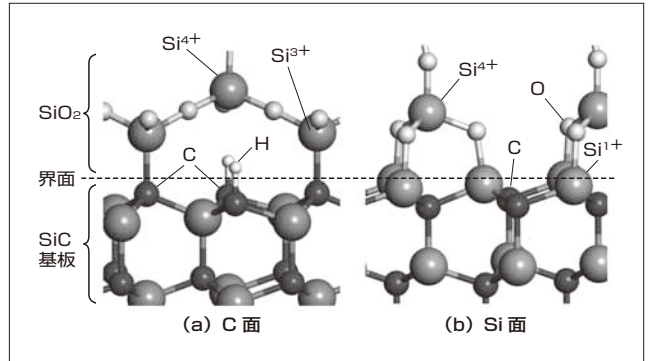


図7 構造最適化計算に基づく理想界面を仮定したドライ酸化膜界面の推定構造のモデル

面や Si 面の表面を作成し、次に SiO₂ 結晶の表面を作成し、その表面同士で C-O 結合が生じないように表面同士を結合させている。また、SiC と SiO₂ を組み合わせる際には、XPS 分析で得られたサブオキサイドを考慮した。その後、組み合わせた状態から、原子の最安定位置を決めるための構造最適化計算を行うことで、理想界面構造とした。その結果を図 7 に示す。図 7 では界面の一部の原子しか表示させていない。図 7 (a) に示す C 面で得られた理想界面構造では、界面に存在する Si は Si³⁺ という化学状態になっている。この理想界面構造を考慮すると、C 面の XPS 分析で観察された Si³⁺ は図 7 (a) のような界面構造に起因し、Si¹⁺ や Si²⁺ は界面の乱れに起因するものと推定される。

Si 面の場合には、図 7 (b) に示すように理想界面構造の界面に存在する Si は Si¹⁺ という化学状態になっている。Si 面の XPS 分析で観察された Si¹⁺ は、このような界面構造に起因していると推定される。

(2) N₂O 酸化

SiC/SiO₂ 界面に窒素原子が導入された分子構造について、Si 面では界面の窒素原子は SiC の炭素原子の位置に入って Si 原子と結合することが知られている⁽⁸⁾。そこで、N₂O 酸化した場合の界面解析を行うに当たり、C 面においても同様に炭素原子の位置に窒素原子が入ると仮定した。ドライ酸化を模擬した理想界面構造を利用し、XPS 分析で得られたサブオキサイドと Si₃N という分子構造を考慮して、炭素原子の位置を窒素原子に置換するように原子を配置した。その後、原子の最安定位置を決めるため、第一原理計算のソフトウェアを用いて構造最適化計算を行うことで理想界面構造を仮定した。

〈注4〉 DMol³: Materials Studio ソフトウェア環境の一部であり、Materials Studio はダッソー・システムズ株式会社の商標または登録商標である。

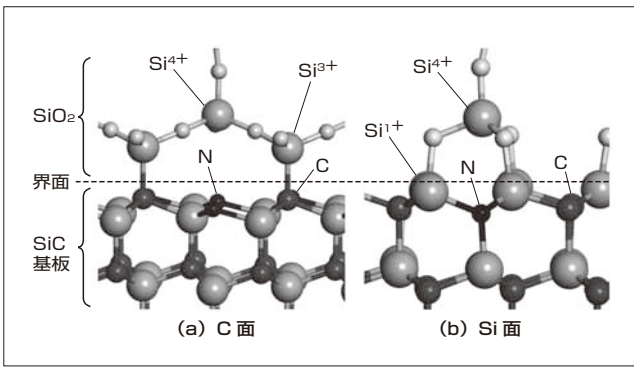


図8 界面において推定される窒素構造のモデル

得られた結果を図8に示す。図8(a)に示したC面の場合、 Si_3N の構造を考慮すると、窒素原子の三つの結合手全てがSiCのSiと結合する構造になるのが妥当と考えられる。さらに、図示していないが、窒素原子の結合手のうち一つが SiO_2 膜側を向いている構造も妥当と考えられる。

図8(b)に示したSi面の場合、窒素原子の結合手のうち二つが SiO_2 膜側を向いている構造になるのが妥当と考えられる。このような窒素原子の入り方は、Xu⁽⁷⁾やShirasawa⁽¹¹⁾が報告している窒素原子が導入された分子構造に類似している。

以上のように、第一原理計算によって界面分子構造を作成することにより、XPS分析で得られた結果を詳細に解析することが可能となった。

4.2 界面準位の解析

SiC/ SiO_2 界面構造で未結合手(DB: Dangling Bond)を付与させた界面構造の例を図9に示す。図9中ではDBを白い棒で示した。C面の場合、図7(a)の界面に存在する炭素を除去してSiのDBが三つある構造とした。その一部を図9(a)に示す。Si面の場合、Okunoらの論文⁽¹²⁾を参考にしてSiのDBを作製した結果を図9(b)に示す。この場合も、図7(b)のSi面と同様にXPS分析で観察された Si^{1+} の結合状態にある。

これらのDBによる界面準位を第一原理計算で調べた結果を図10に示す。C面、Si面ともにDBの界面準位がSiCのバンドギャップ内に形成されていることが分かる。C面は、伝導帯側の下端にも準位が形成されており、これ

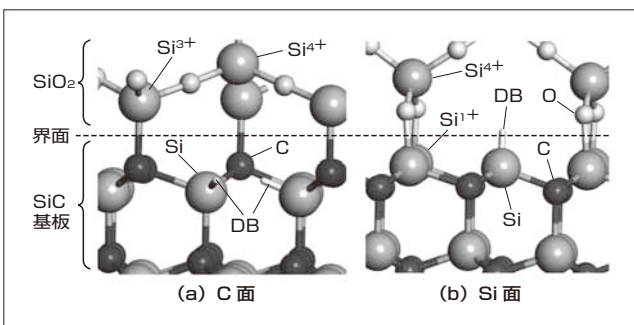


図9 理想界面構造に未結合手(DB)を付与した場合

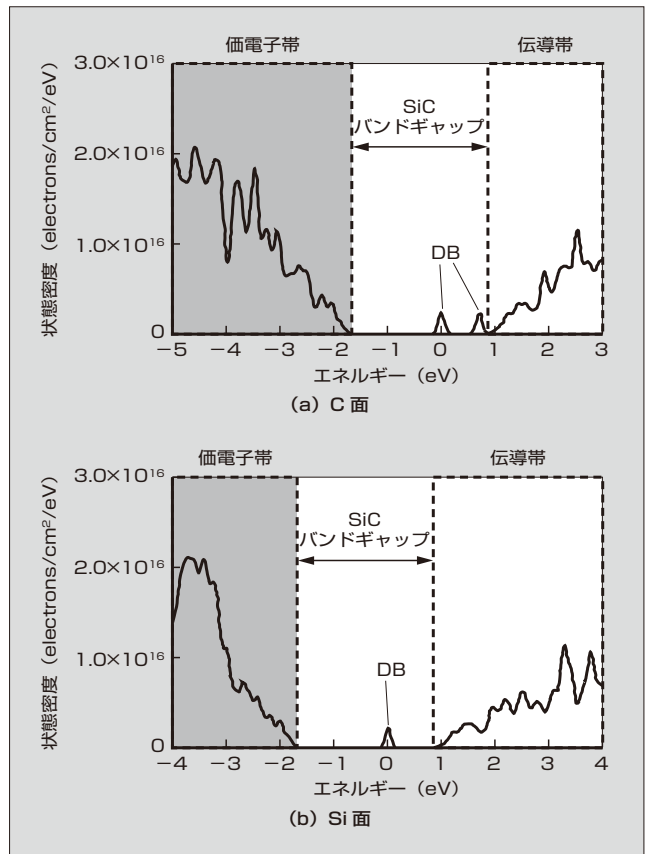


図10 Siの未結合手(DB)を持つ界面構造の状態密度

は三つのSiのDBが隣り合って存在している影響と推測される。Si面は、Okunoらの論文⁽¹²⁾と同等の結果であることが分かった。

界面への窒素原子の導入によって界面準位密度が低減する要因の可能性として、界面準位の原因となるSi原子のDBが、窒素原子との結合によって図8のような末端構造になって界面準位を低減していることが推察される。

DB以外の結合状態でも、SiCバンドギャップ内に界面準位が存在すると、界面準位に電荷がトラップされてクーロン散乱による移動度低下を招いたり、 V_{th} の変動を引き起こしたりする原因になると考えられる。

4.3 今後の課題

第一原理計算では、分子構造の作成だけでなく、分子構造の電子状態を解析することによって、電気特性に影響する界面準位になり得るかを推定することが可能となる。他に、化学反応の容易性を解析することも可能となる。

今回、界面への窒素原子の導入による結合状態の変化を解析し、界面準位減少のメカニズムを考察した。今後、窒素原子の導入のプロセスと特性、分析や第一原理計算による構造解析との相関を調査し、特性改善の方向性を示すことで、MOSFETの特性向上とプロセス改善に貢献したい。

5 あとがき

本稿では、シミュレーションを活用したSiCデバイスの

原子レベルの解析について述べた。

SiC-MOSFET の特性を理解するためには、その特性を左右する SiO₂ 界面近傍の 1 nm 程度の極微小領域に存在する分子構造を解析し、その分子構造が特性にどう影響しているのかを明らかにすることが重要となる。今後も、分析やシミュレーションを駆使して、高性能な SiC-MOSFET の早期製品化に寄与し、パワーエレクトロニクス機器の省エネルギー化により低炭素社会の実現に貢献する所存である。

XPS スペクトル解析を行うに当たり、ご協力とアドバイスをいただいた東京都市大学の野平博司教授に謝意を表す。

参考文献

- (1) Dhar, S. et al. "Interface trap passivation for SiO₂/ (000-1) C-terminated 4H-SiC", J. Appl. Phys. 2005, 98, 014902.
- (2) Chung, G. Y. et al. "Improved inversion channel mobility for 4H-SiC MOSFETs following high temperature anneals in nitric oxide", IEEE Electron Device Lett. 2001, 22, 176-178.
- (3) Jamet, P. et al. "Effects of nitridation in gate oxides grown on 4H-SiC", J. Appl. Phys. 2001, 90, 5058.
- (4) 森大輔ほか. "SiC/SiO₂界面における窒素化学状態の結晶面方位依存性". 信学技報 (IEICE Technical Report) . 2015, vol.115, no.108, SDM2015-42.
- (5) Watanabe, H. et al. "Synchrotron Radiation Photoelectron Spectroscopy Study of Thermally Grown Oxides on 4H-SiC (0001) Si-face and (000-1) C-face Substrates", Mater. Sci. Forum 2012, 717-720, 697-702.
- (6) Watanabe, H. et al. "Synchrotron x-ray photoelectron spectroscopy study on thermally grown SiO₂/4H-SiC(0001) interface and its correlation with electrical properties", Appl. Phys. Lett. 2011, 99, 021907.
- (7) Xu, Y. et al. "Atomic state and characterization of nitrogen at the SiC/SiO₂ interface", J. Appl. Phys. 2014, 115, 033502.
- (8) Delley, B. "An all-electron numerical method for solving the local density functional for polyatomic molecules", J. Chem. Phys. 92, 508 (1990).
- (9) Delley, B. "From molecules to solids with the DMol³ approach", J. Chem. Phys. 113, 7756 (2000).
- (10) Maejima, N. et al. "Site-Specific Atomic and Electronic Structure Analysis of Epitaxial Silicon Oxynitride Thin Film on SiC (0001) by Photoelectron and Auger Electron Diffractions", J. Phys. Soc. Jpn. 2014, 83, 044604.
- (11) Shirasawa, T. et al. "Epitaxial Silicon Oxynitride Layer on a 6H-SiC (0001) Surface", Phys. Rev. Lett. 2007, 98, 136105.
- (12) Okuno, E. et al. "First Principles Theoretical Study of 4h-SiC/SiO₂ Interfacial Electronic States on (0001), (000-1), and (11-20)", Appl. Phys. Express 1, 2008, 061401.



広瀬 隆之

放射光利用材料分析技術、磁気デバイス、光学素子の開発、第一原理計算を用いた樹脂や SiC 半導体デバイスの解析に従事。現在、富士電機株式会社技術開発本部先端技術研究所基礎技術研究センター応用物理研究部。



森 大輔

分析・解析技術の開発と応用に従事。現在、富士電機株式会社技術開発本部先端技術研究所基礎技術研究センター応用物理研究部。応用物理学学会会員。



寺尾 豊

無機 EL の開発、有機 EL の研究・開発、GaN 上強誘電体ゲート酸化膜、InGaN 太陽電池、SiC-MOS デバイスの研究に従事。現在、富士電機株式会社技術開発本部先端技術研究所基礎技術研究センター応用物理研究部。





*本誌に記載されている会社名および製品名は、それぞれの会社が所有する
商標または登録商標である場合があります。