

SiC パワーデバイス開発のためのシミュレーション

プロジェクト責任者

大沼 敏治 財団法人 電力中央研究所

著者

大沼 敏治^{*1}、宮下 敦巳^{*2}、岩沢 美佐子^{*1}、吉川 正人^{*2}、土田 秀一^{*1}、廣川 雄一^{*3}、
西川 憲明^{*3}

*1 財団法人 電力中央研究所

*2 独立行政法人 日本原子力研究開発機構

*3 独立行政法人海洋研究開発機構

利用施設： 独立行政法人海洋研究開発機構 地球シミュレータ

利用期間： 平成 20 年 4 月 1 日～平成 21 年 3 月 31 日

アブストラクト

ワイドギャップ半導体である炭化珪素 (SiC) は従来のシリコン (Si) 系パワー半導体素子に比べて飛躍的な性能向上を実現する半導体材料として期待されており、低損失であることから省エネデバイスとして開発が進められている。また、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) 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ネル移動度が理論的な予想値よりはるかに小さく、その優れた特性を発揮できていないのが現状である。これらの特性を改善するためには、原子レベルで界面の構造と熱酸化の機構を明らかにすることが重要となる。SiC の熱酸化過程のシミュレーションにおいては、化学反応を伴うことと、界面においてさまざまな結合があることから経験的なパラメータを一切用いない第一原理計算が強力なツールとなるが、計算量が膨大となるためにこれまで行われてこなかった。地球シミュレータによる大規模な第一原理分子動力学計算により SiC の熱酸化過程のシミュレーションと SiC 熱酸化膜生成のシミュレーションを行ったので報告する。

キーワード： 第一原理分子動力学計算、SiC パワーデバイス、界面、熱酸化

1. はじめに

家電、産業、自動車、電鉄、或いは電力分野において、半導体電力変換機器の導入量が急速に増大しており、低損失 SiC 半導体を導入した場合の省エネ効果は年間 500 億 kWh にも達すると試算される^[1]。SiC 半導体の適用は、パワーエレクトロニクス機器を用いる家電製品から大電力制御装置に到るほぼ全ての機器設備の性能に大きな変革をもたらすと期待されている。

SiC 半導体は、現在広く用いられている Si 半導体に比べバンドギャップが約 3 倍あることから、低損失で高周波特性に優れ、耐圧、耐熱性、そして耐放射線性が高いという特徴があり、低損失で小

型軽量なパワーデバイス、或いは Si 半導体デバイスでは実現できない過酷な環境で動作する耐熱・耐放射線性デバイスの作製材料として期待されている。さらに SiC は、Si 同様熱酸化により絶縁膜を作製できるため、次世代の MOS (Metal Oxide Semiconductor) 型パワーデバイスの作製材料として有望視されている。しかしながら熱酸化により形成された SiO₂/SiC 界面には、成分変化が急峻で電氣的に活性なダングリングボンド等の欠陥発生がない SiO₂/Si 界面とは異なり、成分変化の緩慢な遷移層が発生し、その内部に界面欠陥が多量に形成されるため、SiO₂/Si 界面に比べ界面準位密度が高くなって MOS 界面反転層のチャンネル移動度が低下してしまう事が知られていた。この問題を解決するには、SiC 半導体を熱酸化したときに形成される遷移層の発生メカニズムを解明するとともに、その内部に形成される界面欠陥の構造とそのエネルギー準位を明らかにし、界面準位密度の低減を図る必要がある。

経験的なパラメータを一切使わず、原子の種類と初期配置を与えるだけで様々な物性を計算出来る第一原理計算法は、SiO₂/SiC 界面に形成される遷移層のように Si のダングリングボンド、炭素のダングリングボンド、炭素クラスター、Si-Si 結合など種々の構造が存在し得る系の電子状態の計算や、結合状態が刻々と変化していく酸化過程の動的シミュレーションなどに威力を発揮する計算手法である。

本研究では第一原理分子動力学法を用いて地球シミュレータを使わないと困難な 1000 原子を越える実状態に近い大規模な SiO₂/SiC 界面の界面欠陥構造を生成し、界面欠陥の物理構造を明らかにする。さらに、地球シミュレータでないと困難な数百原子で 100ps オーダーの酸化反応シミュレーションにより、SiC 結晶表面の酸化膜成長メカニズムと欠陥構造の形成過程を明確にし、酸化条件について検討する。これにより MOS 型パワーデバイスの電気特性を最大限に引き出せる物理的界面形成法の開発指針を得る。

2. 計算手法

計算はウィーン大学で開発された密度汎関数理論に基づく第一原理計算コード、VASP (Vienna ab initio Simulation Package) により行った^[2,3]。三次元周期境界条件による固体向きの計算手法である。価電子は平面波基底で扱い、内殻電子は PAW (Projector Augmented Wave) 法により全電子計算でありながら効率的な計算を行っている。電子相関は Perdew- Burke Ernzerhof らによる一般化勾配近似を用いた^[4]。ブリルアンゾーンのサンプリングは Γ 点のみ用いている。

VASP の地球シミュレータにおける並列化およびベクトル化のチューニングは、対角化や三次元 FFT のルーチンを地球シミュレータにチューニングされたものと置き換えることにより行った。1017 原子のスーパーセルにおける 10 ノード (80 プロセッサ) における並列化効率は 99%、ベクトル演算率 99% で、実行速度は 382 GFlops であり、ピーク性能に対する実行効率は 59.7% であった。

3. SiC 熱酸化過程のシミュレーション

SiC の熱酸化は供給された酸素分子が SiO₂/SiC 界面付近まで拡散し、酸素分子が界面で SiC を酸化することにより起きると考えられている。そのため SiC の熱酸化過程のシミュレーションは SiO₂/SiC の界面モデルを作成し、酸素分子を界面付近に供給することにより行った。界面モデルは以下のように作成した。計算は三次元周期境界条件で行うため二次元構造である界面は SiC 層、SiO₂ 層および真空層からなるスラブモデルを用いて作成する。界面モデル作成の初期構造として SiO₂ 層は

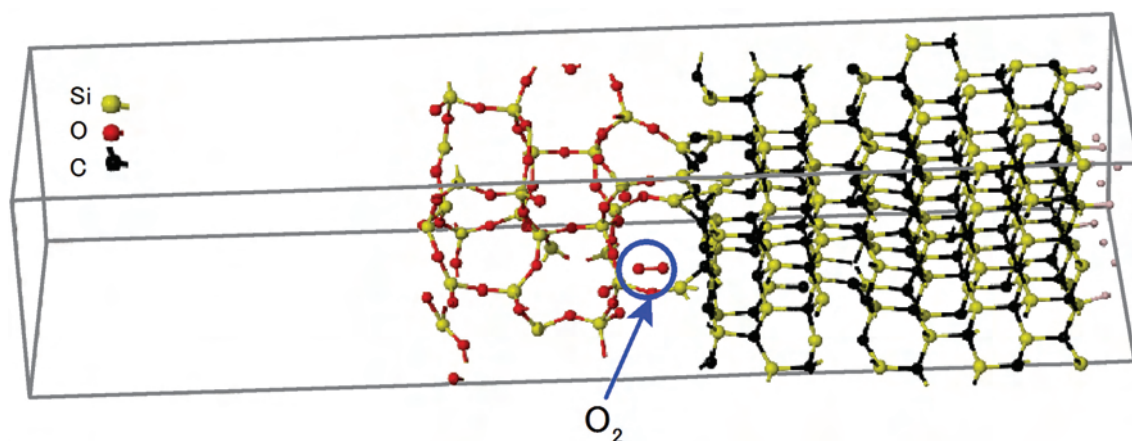


図1 酸化過程のシミュレーションで用いた SiO₂/SiC 界面モデル。SiO₂ 中の界面近くの空隙に酸素分子を供給することによりシミュレーションを行う。

SiO₂ の結晶構造の一つであるトリデマイト構造を SiC の炭素面と結合した。界面における原子間の結合の歪みを取り除くために 3500K で 3ps 加熱し、その後常温まで急冷することにより界面モデルを作成した。これにより界面におけるダングリングボンドや Si-Si 結合などの欠陥の無い界面モデルを作成することに成功した。なお、第一原理分子動力学計算における時間刻みステップは 1fs である。このようにして作成した界面構造を図1に示す。

実験においては酸素分子が真空層側から供給されて酸化が進むが、計算時間を短縮するために酸素分子が SiO₂/SiC 界面付近まで拡散してきたものとして、酸素分子を SiO₂ 層中の界面近くの空隙に追加してシミュレーションを行った。SiO₂/SiC 層の空隙の大きさは 2 Å 以上あり、第一原理分子動力学計算において酸素分子のまま SiO₂/SiC 層中を拡散していくことを確認している。熱酸化の実験において酸化温度は 1500K 程度であり、酸化の進んでいくタイムスケールとしては秒のオーダーである。シミュレーションにおいては 1fs の時間刻みで計算するため数十万ステップ計算しても数 100ps のオーダーとなる。このような場合、化学反応などを時間的に加速するための高温におけるシミュレーションが行われる。SiO₂/SiC 界面は酸素分子の無い条件では 2500K において安定に存在し、熱運動では構造が変化しないことから加速温度として 2500K を選んだ。さらに、温度による酸化過程の違いを調べるために、より低温でのシミュレーションに挑戦した。酸素の供給時間の間隔を約 2 倍にすることにより実験温度である 1500K におけるシミュレーションに成功した。これにより酸化温度が原子レベルで酸化過程に及ぼす影響について調べることが可能となった。

2500K における酸化過程のシミュレーションにおいては、酸素分子を 8ps 毎に SiO₂ 層中の空隙に追加した。酸素分子は SiO₂ 層中の界面の Si 原子や SiC 層の界面 C 原子と結合解離した。酸化された C 原子は熱運動により CO₂ 分子や CO 分子として脱離し SiO₂ 層中を拡散した。酸素分子が 10 個解離した 80ps におけるスナップショットを図2に示す。界

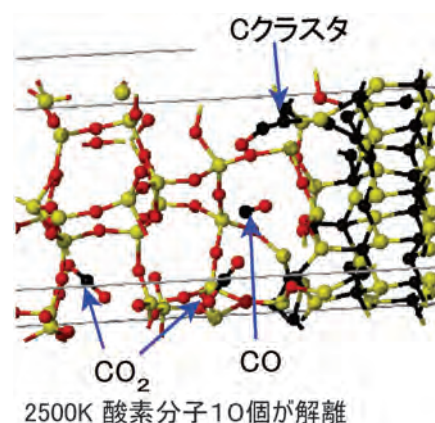
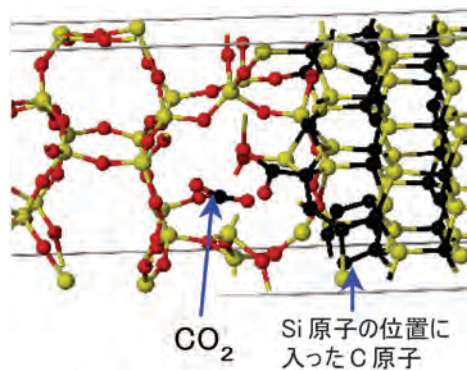


図2 2500K における SiC の酸化シミュレーションの 80ps のスナップショット。

面準位の原因とされる炭素クラスタが界面から見て SiO₂ 層側に生成していることがわかる。酸化過程を詳細に解析した結果、2500K においては SiC が 1 層ずつ酸化される単層酸化が起きているということがわかった。

1500K における酸化過程のシミュレーションにおいては、酸化反応などに時間が掛かることから 2500K のシミュレーションの約 2 倍の時間間隔である 15ps 毎に酸素分子を SiO₂ 層中の空隙に追加した。酸素分子は、2500K と同様に SiO₂ 層中の界面の Si 原子や SiC 層の界面 C 原子と結合解離するが、酸化した C 原子の熱運動による CO₂ 分子や CO 分子の脱離はあまり起こらずに、SiC の二層目の Si 原子の酸化が起こった。SiO₂ 層中を拡散した酸素分子が 10 個解離した 150ps におけるスナップショットを図 3 に示す。二層目の Si が酸化されると SiO₂ として SiO₂ 層へと放出される。それにより生じた Si 原子の位置に界面の C 原子が移動し、SiC 層側に小さな炭素クラスタが生成した。1500K では SiC 層は界面の C 層だけでなく二層目の Si 層も同時酸化される二層酸化が起きていることが明らかになった。



1500K 酸素分子10個が解離

図 3 1500K における SiC の酸化シミュレーションの 150ps のスナップショット

4. アモルファス SiO₂/SiC 界面の生成

前節で SiO₂/SiC 界面における酸化過程のシミュレーションについて述べた。使用した界面モデルでは SiO₂ 層の構造は SiO₂ の結晶構造の一つであるトリデマイト構造をもとに加熱、急冷したものをを用いている。生成された SiO₂ 層の構造ではトリデマイトの構造が多く残っている。熱酸化の実験で形成された SiO₂ 層はアモルファス構造となっていると考えられており、SiO₂/SiC の界面構造がどのようなになっているか調べるため本節ではアモルファス構造を持つ SiO₂/SiC 界面の構造を第一原理分子動力学計算により作成する。

アモルファス構造を計算機上で作成する方法の一つは、加熱して融解し液化し構造を乱してから急冷し固体化することである。本シミュレーションでは SiO₂ の初期構造として水晶の構造を用いて SiC の Si 面に結合させている。この界面の初期構造においては SiC の界面 Si 原子の 1/3 はダンダリングボンドとなっており、欠陥が残っているものである。この界面の初期構造を 4000K に加熱し SiO₂ 層を融解させた後、3500K でアニーリングし、その後一定速度で室温まで急冷する。4000K での融解の際には、SiO₂ 層の真空層側の末端原子を固定しておき、蒸発が起きないようにしている。3500K でのアニーリングの際に末端を開放することにより高温で膨張している SiO₂ の圧力を緩和し、それにより SiO₂ (水晶構造) の密度をアモルファス SiO₂ の密度へと下げる。その後 -2000K/ps, -1000K/ps, -500K/ps で室温まで急冷した。図 4 に示したように、冷却速度が小さくなるにつれて、全エネルギーが低くなっており、冷却速度が小さい方が生成した構造が安定であるということがわかる。界面の原子構造については、-2000K/s の冷却速度では Si ダングリングボンド、Si-Si 結合、5 配位 Si の欠陥構造があったものが -500K/s の冷却構造ではこれらの界面欠陥が解消されている。これにより良好なアモルファス SiO₂/SiC 界面を生成させることに成功した。

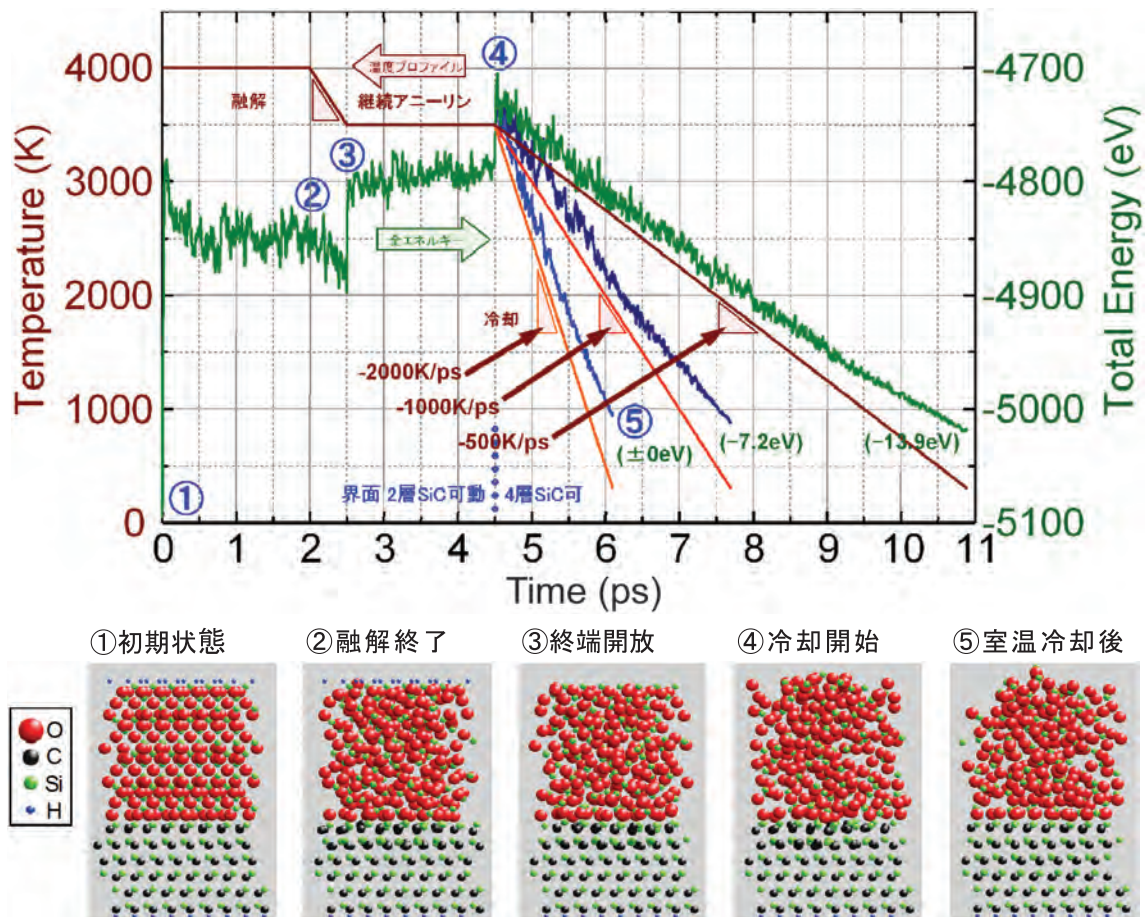


図4 第一原理分子動力学法によるアモルファス SiO₂/SiC 構造の生成

5. まとめ

SiCの熱酸化のシミュレーションは、アモルファス構造のSiO₂とSiCからなる複雑な界面構造と、酸化過程のような化学反応を含むシミュレーションからなるため、化学反応の計算が可能で、結合の次数が変化する系の取り扱いも可能な第一原理分子動力学計算が非常に強力なツールであるが、原子数が増えるにつれて計算量が膨大になるためこれまで行うことは不可能であった。今回我々は地球シミュレータを利用することにより、第一原理分子動力学計算で100psを越えるような酸化過程のシミュレーションや、1000原子を越えるアモルファス構造を持つ界面の構造をシミュレーションすることが可能となった。SiC熱酸化のシミュレーションでは酸化温度を変えたシミュレーションを行うことにより、1500Kと2500Kでどちらの場合でも酸化過程の途中において炭素クラスターが生成すること、炭素クラスターの形が異なることを見出した。また酸化の進み方が2500Kでは単層酸化となるが1500Kでは二層酸化となることがわかった。アモルファスSiO₂/SiC界面の生成シミュレーションにおいては、界面において欠陥構造を解消する生成条件を見出すことが出来、良好なアモルファスSiO₂/SiC界面を生成することに成功した。次の段階として、酸化条件やアニーリングの効果や界面構造の乱れと電気特性の関連についてのシミュレーションを行いたい。

謝 辞

本研究は、文部科学省平成 20 年度地球シミュレータ産業戦略利用プログラム「SiC パワーデバイス開発のためのシミュレーション」の一環として行われた。地球シミュレータの利用に際しては、独立行政法人海洋研究開発機構 計算システム計画・運用部 産業利用推進グループ 新宮哲氏、上原均氏にご指導、ご助言を頂きました。深く感謝いたします。

参考文献

- 1) G. Kresse and J. Furthmuller, Phys. Rev. B54, 11169 (1996)
- 2) G. Kresse and D. Joubert, Phys. Rev. B59, 1758 (1999)
- 3) J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. 77, 3865 (1996)

外部発表など

- 1) 大沼、岩沢、土田、宮下、吉川、“Dynamical simulation of SiO₂/4H-SiC C-face interface oxidation process at 1500K”、E-MRS 2008 fall meeting (ワルシャワ、ポーランド)、2008 年 9 月 15 日
- 2) 宮下、大沼、岩沢、土田、吉川、“Amorphous SiO₂/SiC interface defect structure generated with first-principles molecular dynamics simulation”、MRS fall meeting 2008 (ボストン、アメリカ)、2008 年 12 月 2 日
- 3) 大沼、岩沢、土田、宮下、吉川、「SiO₂/4H-SiC C 面における酸化過程の動的シミュレーション：温度の効果」、SiC 及び関連ワイドギャップ半導体研究会 第 17 回講演会 (大田区産業プラザ)、2008 年 12 月 8 日
- 4) 宮下、大沼、岩沢、土田、吉川、「第一原理分子動力学法にて生成された大規模アモルファス SiO₂/SiC モデルにおける界面構造」、SiC 及び関連ワイドギャップ半導体研究会 第 17 回講演会 (大田区産業プラザ)、2008 年 12 月 8 日
- 5) 大沼、岩沢、土田、宮下、吉川、「第一分子動力学法による SiO₂/4H-SiC C 面酸化過程シミュレーション：温度の効果」日本応用物理学会春季講演会 (筑波大学)、2009 年 3 月 30 日
- 6) 宮下、大沼、岩沢、土田、吉川、「第一原理分子動力学シミュレーションで生成されたアモルファス SiO₂/SiC 界面構造における界面接続モデル」2009 年春季 第 56 回応用物理学関係連合講演会 (筑波大学)、2009 年 3 月 30 日