

シリコンカーバイド熱酸化膜形成プロセスの解析

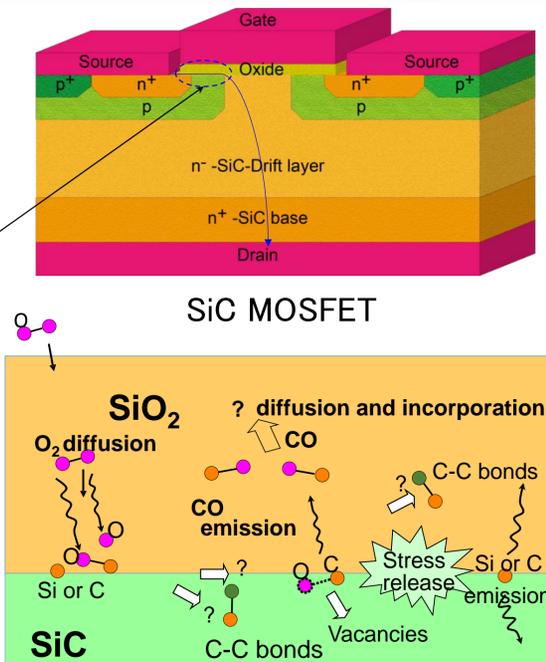
研究概要

シリコンカーバイド(SiC)を用いた低損失パワーデバイスの開発が近年推進。

- ・ワイドバンドギャップ、高絶縁破壊性、高耐熱性で利用範囲拡大。
- ・SiCの熱酸化により絶縁膜(SiO₂)形成。FET構造形成が容易。

現状のデバイスはキャリア移動度が低く理論性能に遠い。SiO₂/SiC界面の欠陥準位が問題原因と考えられている。

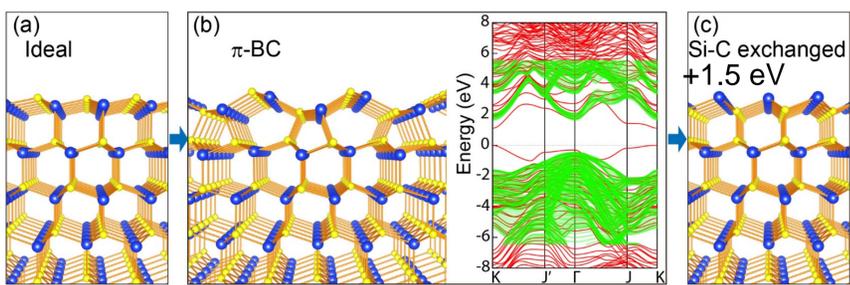
SiCの熱酸化機構、界面に生成される構造を第一原理分子動力学(MD)計算に基づいて検討。SiC面方位の違いが及ぼす影響は？



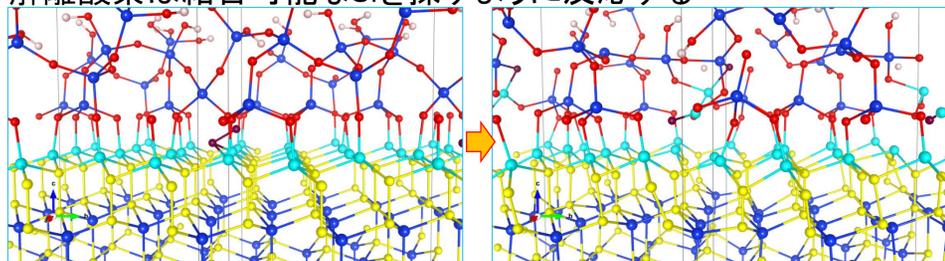
5年間の成果

「京」で得られた成果

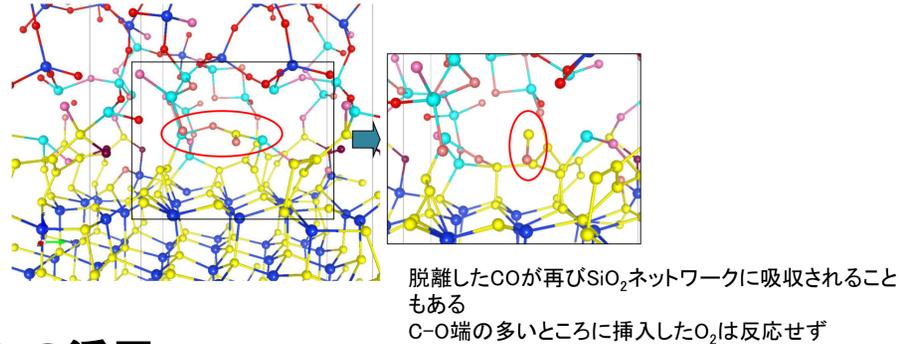
- ・SiC最安定表面構造はπ-bonded chain 構造



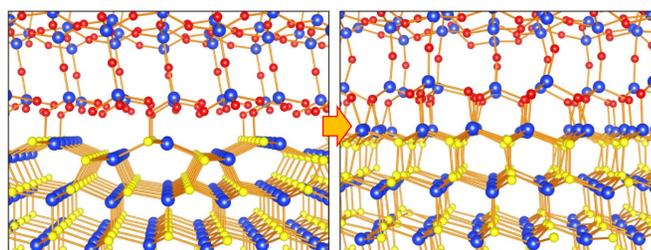
- ・界面Siは酸化によりSiO₂層へ拡散
- ・解離酸素は結合可能なSiを探すように反応する



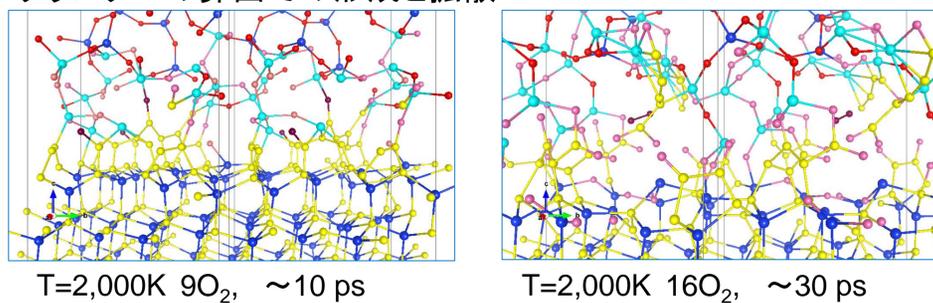
- ・Si-C(=O)-O-SiなどからCO脱離
- C面でこの反応が起きやすい可能性



- ・O₂分子はSiC表面・界面でSi原子と反応し、解離吸着
- ・SiC(000-1)C面/SiO₂界面ではより多くのC-C結合が形成される→理想的界面構造の提案



- ・Cクラスターの界面での形成と拡散

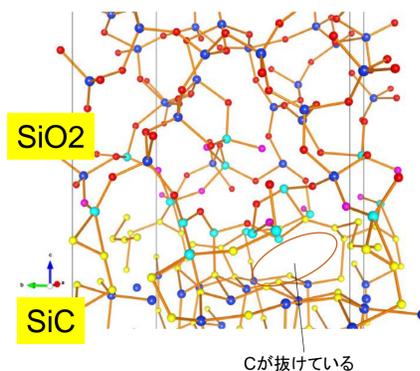


- ・SiC(000-1)C面/SiO₂界面での局所的表面の露出
- 次層の酸化を容易にする、層状酸化の可能性

温度・全圧・酸素分圧等の最適化により、層状熱酸化を誘起すれば、基板表面は平坦になり、高品質なMOS界面が得られる。

⇒ 特許出願2015/7/29

- ・界面近傍の欠陥準位を解析
- ・キラース準位の絞り込みと制御法の探索、不活性化の提案
- ⇒ 特許出願の手続き中

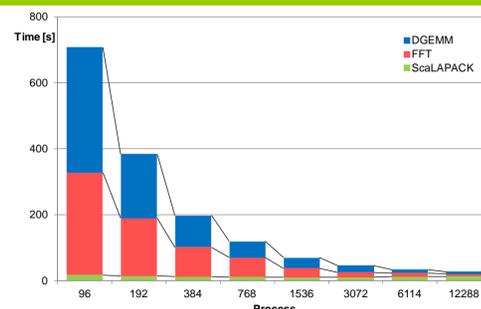


「京」の活用

- ・プログラムPHASE/0(<https://azuma.nims.go.jp/>)を京上で使用。
- ・計算は密度汎関数理論(擬ポテンシャル/平面波基底)がベース。
- ・3次元並列化(k空間, バンド, G空間の軸)による並列性能向上。
- ・FFT分散化による高速化。
- ・6次元Tofu/Meshネットワークの有効利用によるFFT通信最適化。

将来の展望

右図: 京上の並列計算でのスケーラビリティ(SiC 3800原子系)



- ・解析結果に基づき欠陥準位生成抑制の処方を検討し、特許出願、ビジネス展開。