SiC 熱酸化抑制プロセスによる高品質 SiC/SiO_2 界面の形成

Formation of high-quality SiC/SiO_2 interfaces by suppressing SiC oxidation

京大院工 [1]，東工大フロンティア [2]　○小林 拓真 [1,2]，奥田 貴史 [1]，立木 馨大 [1]，伊藤 滉二 [1]，
松下 雄一郎 [2]，木本 恒暢 [1]

Kyoto Univ. [1], Tokyo Tech[2], ○Takuma Kobayashi[1,2], Takafumi Okuda[1], Keita Tachiki[1], Koji Ito[1],
Yu-ichiro Matsushita[2], Tsunenobu Kimoto[1]

E-mail: kobayashi@prec.eng.osaka-u.ac.jp

SiC は広い禁制帯幅および高い絶縁破壊電界等の優れた物性を有し、電力変換用のパワーデバイスに最適な材料である[1]。一方で SiC は、SiO_2 絶縁膜との間に十分な伝導帯・価電子帯オフセット（2.7 – 3.0 eV）を確保でき、MOSFET の作製にも適している。SiC MOSFET は既に量産が開始しているが、産業機器や民生品への普及で期待される 0.6 – 1.2 kV 級デバイスでは、チャネル抵抗がオン抵抗の大半を占める[2]。この原因は、SiC/SiO_2 界面の高い界面準位密度（D_{it}; ~ 10^{13} cm^{-2} eV^{-1}）である。低損失デバイスの実現には、界面準位の起源解明および低減が不可欠である。

まず、著者らは界面準位の起源解明に取り組んだ。SiC の酸化過程で界面近傍に残留する炭素原子が界面欠陥を形成すると広く信じられてきたものの、その検出は困難を極めた。問題は、通常の物理分析の定量下限は母体元素の 0.3 – 1%程度に留まるため[1]、炭素欠陥が存在したとしても SiC を構成する炭素との見分けが難しいことである。そこで、著者らは SiC/SiO_2 構造に高純度 Ar 熱処理を施すことで、炭素欠陥を分解し、酸化膜側に取り出すことで検出することを試みた[3]。実際に二次イオン質量分析法（SIMS）により、熱酸化 SiC/SiO_2 界面からは、熱処理で 10^{20} cm^{-3} 以上と高密度の炭素原子が拡散することを見出し、界面炭素欠陥の存在を確かなものにした。

また、炭素欠陥を対象とした第一原理計算にも取り組んだ。具体的には SiC 側、SiO_2 側、SiC/SiO_2 界面の全域で計 114 通りの欠陥構造を仮定し、それらの形成エネルギーを計算することで、安定な欠陥の形態および電子準位を報告している[4]。なお、計算では各元素の化学ポテンシャルを NIST-JANAF 熱力学表[5]に従い較正することで、有限温度での安定性を議論した。結果、酸素リッチ条件では、界面の Si-CO-CO_2 や SiC 中の$(C_2)_{Si}$ 等、多数の炭素欠陥が安定化することを指摘した。

以上の物理分析および第一原理計算の結果から、SiC の熱酸化過程では不可避に炭素欠陥が生成すると考え、酸化を極限まで抑制した絶縁膜形成プロセスの開発に取り組んだ。実際に SiC 表面を水素エッチングで清浄化後、in-situ で Si 薄膜を堆積し、低温酸化（750°C）で Si を SiO_2 に変換した上で界面 N_2 窒化[6-7]を施すことで、< 5 × 10^{10} $cm^{-2}eV^{-1}$ の低い D_{it} 値を達成した[8]。本手法のポイントは、水素エッチングで SiC 表面近傍の欠陥を除去すること[9]、SiC が一切酸化しない低温条件で Si 薄膜のみを酸化すること、窒素導入により界面未結合手等の欠陥を終端することである。講演当日は、本稿で述べた実験・理論計算の紹介に加え、その後の進展を含めた報告を行う。

本研究は、JST 研究成果展開事業（スーパークラスタープログラム）、産学共創プラットフォーム共同研究推進プログラム（OPERA）、および JSPS 科研費 18H03770、18H03873 の助成を受けたものです。計算は、主に東京大学物性研究所および筑波大学計算科学研究センターのスーパーコンピュータを利用して実施されました。

[1] T. Kimoto and J. A. Cooper, *Fundamentals of Silicon Carbide Technology*, (Wiley, Singapore, 2014).
[2] T. Kimoto and H. Watanabe, *APEX* **13**, 120101 (2020).
[3] T. Kobayashi and T. Kimoto, *APL* **111**, 062101 (2017).
[4] T. Kobayashi and Y. Matsushita, *JAP* **126**, 145302, (2019).
[5] *NIST-JANAF Thermochemical Tables* [https://janaf.nist.gov/].
[6] A. Chanthaphan, *et al.*, *AIP Adv.* **5**, 097134 (2015).
[7] K. Tachiki and T. Kimoto, *IEEE TED* **68**, 638 (2021).
[8] T. Kobayashi, *et al.*, *APEX* **13**, 091003 (2020).
[9] K. Tachiki, *et al.*, *APEX* **13**, 121002 (2020).

© 2022年 応用物理学会