

令和 3 年 5 月 25 日現在

機関番号：14401

研究種目：研究活動スタート支援

研究期間：2019～2020

課題番号：19K23514

研究課題名（和文）炭化ケイ素MOS界面におけるキャリア輸送に関する理論研究

研究課題名（英文）Theoretical Study on Carrier Transport in SiC MOS Interfaces

研究代表者

田中 一（Tanaka, Hajime）

大阪大学・工学研究科・助教

研究者番号：40853346

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 2,000,000円

研究成果の概要（和文）：本研究では、SiC MOS反転層でのキャリア散乱モデルを構築し、可動電子のHall移動度の計算を行った。散乱過程のうち、電気的に中性な欠陥の空間的な分布についてのフィッティングを行い、実験的に報告されているSiC MOSFETにおけるHall移動度の振る舞いをある程度再現することに成功した。このモデルに基づき、ドリフト移動度やデバイスとしてのドレイン電流の特性を記述する実効移動度の検討も行った。また、上記に加え、バルクSiCの電子状態・三角ポテンシャルにおける2次元電子状態の、より高精度な解析を行った。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究で構築したキャリア散乱モデルにより、多数のフィッティングパラメータを含むという問題点はあるものの、実験で報告されているSiC MOS反転層における移動度の振る舞いを、ある程度よく再現することができた。本成果は、今後の移動度律速要因の解明や、移動度向上指針の提示の基礎となる。また、電子状態のより高精度な記述は、MOS反転層の移動度モデルの高精度化につながるものである。

研究成果の概要（英文）：In this study, a carrier scattering model for SiC MOS inversion layers was developed and the Hall mobility of mobile electrons was calculated. Among the scattering processes, by fitting the parameters for the spatial distribution of electrically neutral defects, the experimentally reported behaviors of Hall mobility in SiC MOSFETs were reproduced to some extent. Based on this model, the drift mobility and the effective mobility, which describes the drain current characteristics of devices, were also investigated. In addition, the electronic states in bulk SiC and the two-dimensional electronic states in triangular potential were analyzed based on a more accurate description.

研究分野：半導体物性

キーワード：炭化ケイ素 MOS界面 移動度 シミュレーション

## 1. 研究開始当初の背景

パワーデバイスによる電力変換は現代社会にとって不可欠なものとなっている。しかし、現在主に用いられているシリコン (Si) パワーデバイスは、技術的な成熟により、Si の材料物性によって決まる理論限界に直面している。そこで、このような Si デバイスの限界を突破することができる新材料の一つとして、炭化ケイ素 (SiC) が注目を集めている。SiC はバンドギャップの大きさにより絶縁破壊電界強度が大きく、理想的には、同じ耐圧の素子を作製する場合の導通損失を Si の場合と比べ 2 桁以上低減できる。したがって、現在の主流である Si パワーデバイスを、SiC パワーデバイスに置き換えることができれば、パワーデバイスの大幅な低損失化が実現できると期待される。

SiC パワーデバイスのうち、SiC MOSFET は既に製品化も開始されている。しかし、SiC バルク結晶中の電子移動度に比べ、SiC MOSFET のチャネル移動度は著しく低い。そのため、SiC の物性から期待される性能を発揮できていない。チャネル移動度低下の主な要因は、SiO<sub>2</sub>/SiC 界面に存在する高密度の界面準位である。MOS 反転層に誘起されたキャリアの多くが界面準位にトラップされ、伝導に寄与できなくなることで、デバイス特性上のチャネル移動度が低下する。また、このような多数の界面準位が存在する SiC MOS 界面では、界面準位が十分少ない Si などの MOS 界面と比べ、散乱メカニズム等、キャリア輸送現象に大きな違いがあることが予想される。SiC MOS 界面におけるキャリア輸送については未解明な点が多く、理論モデルに基づき移動度等のキャリア輸送物性を予測できる状態には達していない。そのため、SiC MOS 界面におけるキャリア輸送現象を解明し、移動度などの物性値の予測を可能とする理論の構築が求められている。

## 2. 研究の目的

以上で述べたように、SiC MOSFET は、電力変換時の損失を低減できる次世代パワーデバイスとして期待されている。本研究では、この SiC MOSFET の MOS 反転層におけるキャリア輸送を記述できる理論モデルを構築することを目指す。その目的のため、(1) SiC MOS 界面におけるキャリア散乱過程のモデル化、(2) 散乱モデルに基づく移動度をはじめとしたキャリア輸送特性の解析、(3) モデルの高精度化へ向けた、経験的擬ポテンシャル法を用いて結晶構造を考慮した電子状態の解析、の 3 つの項目について研究を行った。

## 3. 研究の方法

本研究のうち、上記(1)については、有効質量近似による反転層のサブバンドおよび波動関数の計算とポアソン方程式によるポテンシャル分布の計算を自己無撞着に行い、得られた波動関数を基に、フォノン散乱・イオン化不純物散乱・界面ラフネス散乱・界面固定電荷および界面準位捕獲電子によるクーロン散乱・電氣的に中性な欠陥による散乱について、散乱レートを計算した。これらの散乱レートを考慮して、モンテカルロ法により Hall 移動度を求め、電氣的に中性な欠陥の空間的な分布について、相関関数を仮定して、その中のパラメータを変化させることで実験結果へのフィッティングを行った。(2)では、(1)でのモデルを用いて、Hall 移動度の振る舞いを解析するとともに、Hall 移動度だけでなく、ドリフト移動度、さらに、界面準位捕獲電子の密度を考慮した、MOSFET としての実効移動度の計算を行った。加えて、モンテカルロ法を用いて、高電界印加時におけるキャリア輸送特性の解析も行った。また、(3)については、経験的擬ポテンシャル法を用いて SiC における電子状態を記述し、バルクおよび三角ポテンシャルにおける電子状態の解析を行った。

## 4. 研究成果

### (1) SiC MOS 界面におけるキャリア散乱のモデル化

上記で説明した、フォノン散乱・イオン化不純物散乱・界面ラフネス散乱・界面固定電荷および界面準位捕獲電子によるクーロン散乱・電氣的に中性な欠陥による散乱を考慮したモデルを用いる計算において、電氣的に中性な欠陥が無相関に分布していると仮定した場合の計算結果を、実験値とともに図 1 に示す。この場合には、実験で得られた Hall 移動度のボディ層のアクセプタ密度依存性を再現するには、中性欠陥密度を高アクセプタ密度ほど大きく増加させる必要がある。

これに対して、電氣的に中性な欠陥がクラスター状にまとまって分布していることに相当する条件で計算を行った結果を図 2 に示す。図 2 に示したパラメータを用いることで、実験的に報告されている SiC MOSFET における Hall 移動度のボディ層アクセプタ密度依存性を、ある程度再現することに成功した。この際には、界面準位の状態密度について、近年の報告 (K. Ito

et al., J. Appl. Phys., 128, 095702 (2020))に基づき、反転層サブバンドの2次元状態密度端と共にエネルギーがシフトするという仮定も導入した。

散乱過程に対する検討としては、上記に加え、SiC MOS 界面に電気双極子が分布していると仮定した場合のHall移動度の計算も行った。

### (2) 散乱モデルに基づくキャリア輸送特性の解析

図2で用いたモデルに基づき、Hall移動度だけでなく、ドリフト移動度、およびデバイスとしてのドレイン電流の特性を記述する実効移動度の検討も行った。ドリフト移動度はHall移動度と近い値となり、Hall移動度とドリフト移動度の比較から、Hall因子は1~1.5程度の値となった。また、ドリフト移動度に、反転層に誘起された全電子密度のうちの可動電子密度が占める割合を掛けることで求めた実効移動度は、ドリフト移動度の半分程度以下の値となり、その値は実験で報告されている値と近い値となった。さらに、SiC MOS 界面において存在するポテンシャル揺らぎを考慮した、Hall移動度およびドリフト移動度の解析も行った。

モンテカルロ法によるキャリア輸送計算の手法を用いて、高電界印加時のキャリア輸送特性についても解析を行った。具体的には、解析的なバンド構造を仮定し、ブリルアンゾーン幅、有効質量などのパラメータを幅広い条件で変化させて高電界キャリア輸送のシミュレーションを行った。また、散乱率を変化させた場合の計算も行った。これらの検討により、バンド構造および散乱過程がキャリアのドリフト速度や衝突イオン化係数などの高電界輸送特性に与える影響に関して理解を深めた。

### (3) 経験的擬ポテンシャル法を用いた電子状態の解析

上記で述べたSiC MOS反転層の解析においては、電子状態を記述するにあたって、有効質量近似を用いていた。本研究では、これに加えて、SiC MOS反転層における電子状態のより精密な記述へ向けて、経験的擬ポテンシャル法を用いた、バルクSiCの電子状態、および三角ポテンシャルにおける2次元電子状態の計算を行った。まず、バルクのSiCについて、バンド構造を再現するように経験的擬ポテンシャルのパラメータをフィッティングした。そのパラメータを用いてバルクSiCの電子状態の計算を行い、第一原理計算で報告されている、結晶構造中の原子から離れた格子間位置に主に電子が分布する「浮遊電子状態」の特徴が経験的擬ポテンシャル法によっても再現されることを示した(図3)。さらに、この手法をSiCのスラブ(薄膜)構造および三角ポテンシャルに閉じ込められた電子状態に適用し、結晶構造を考慮したSiC MOS反転層における電子状態の解析が可能であることを示した。

以上、(1),(2)の成果は、実験結果を再現可能なSiC MOS反転層におけるキャリア輸送のモデルを構築したもので、SiC MOS界面におけるキャリア移動度律速要因の解明および移動度向上指針の提示の基礎となるものであると言える。また、(3)の成果は、SiC MOS反転層におけるキャリア輸送特性解析の高精度化につながるものであると言える。

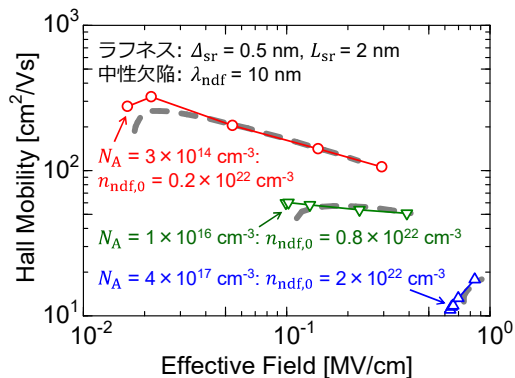


図1 SiC MOS反転層におけるHall移動度の実効垂直電界依存性の計算結果. ここでは中性欠陥の空間分布を無相関としている. 灰色の線で示す実験結果 (M. Noguchi et al., IEDM2017, 219 (2017))を再現するには、中性欠陥密度  $n_{ndf,0}$  がアクセプタ密度  $N_A$  に強く依存すると仮定する必要がある。

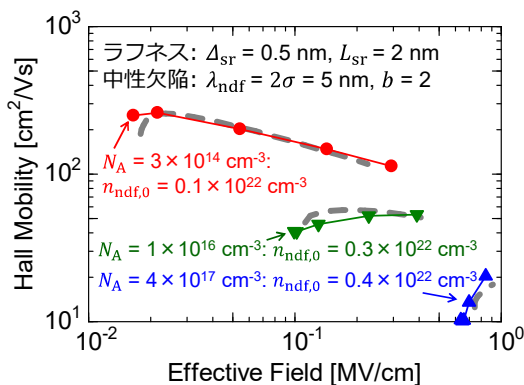


図2 中性欠陥の分布について、クラスターの半径  $2\sigma$ 、クラスター化の度合い  $b$  をパラメータとして用いて計算した、SiC MOS反転層におけるHall移動度. 灰色の線で示す実験結果(図1と同様)を、アクセプタ密度  $N_A$  が  $1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  以上の範囲において、中性欠陥密度  $n_{ndf,0}$  の  $N_A$  依存性を抑えつつ、よく再現できている。

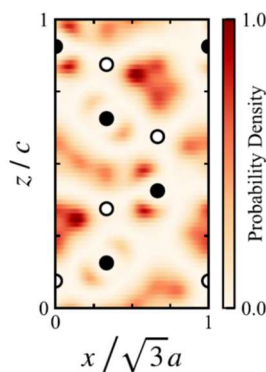


図3 経験的擬ポテンシャル法で計算した、バルク4H-SiCの伝導帯底における電子状態の確率密度分布。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計1件（うち査読付論文 1件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 H. Tanaka, T. Kimoto, and N. Mori	4. 巻 13
2. 論文標題 Theoretical analysis of band structure effects on impact ionization coefficients in wide-bandgap semiconductors	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Applied Physics Express	6. 最初と最後の頁 041006-1~4
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.35848/1882-0786/ab7f16	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計9件（うち招待講演 2件/うち国際学会 4件）

1. 発表者名 H. Tanaka and N. Mori
2. 発表標題 Monte Carlo Simulation of Hall Mobility in 4H-SiC MOS Inversion Layers
3. 学会等名 International Conference on Silicon Carbide and Related Materials 2019（国際学会）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 H.Tanaka, N. Mori, and T. Kimoto
2. 発表標題 Theoretical Study of Band Structure Effects on Impact Ionization Coefficients in Wide-bandgap Semiconductors
3. 学会等名 9th Asia-Pacific Workshop on Widegap Semiconductors（国際学会）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 田中 一, 木本 恒暢, 森 伸也
2. 発表標題 衝突イオン化係数のバンド構造に対する依存性の理論的解析
3. 学会等名 第81回応用物理学会秋季学術講演会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 田中 一, 森 伸也
2. 発表標題 界面準位の影響に着目したSiC MOS反転層における電子輸送の理論的検討
3. 学会等名 応用物理学会先進パワー半導体分科会第6回個別討論会 (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 永溝 幸周, 田中 一, 森 伸也
2. 発表標題 経験的擬ポテンシャル法を用いた4H-SiCにおける浮遊電子状態の計算
3. 学会等名 応用物理学会先進パワー半導体分科会第7回講演会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 N. Mori, H. Tanaka, T. Hoshino, and G. Mil'nikov
2. 発表標題 Monte Carlo simulation of two-dimensional carrier mobility in wide-gap semiconductor devices
3. 学会等名 International Symposium on Wide Gap Semiconductor Growth, Process and Device Simulation 2021 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 S. Nagamizo, H. Tanaka, and N. Mori
2. 発表標題 Electronic States in 4H-SiC MOS Inversion Layers Considering Crystal Structure Using Empirical Pseudopotential Method
3. 学会等名 International Workshop on Computational Nanotechnology 2021 (国際学会)
4. 発表年 2021年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究協力者	永溝 幸周  (Nagamizo Sachika)		

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------