

令和 4 年 5 月 27 日現在

機関番号：12601

研究種目：研究活動スタート支援

研究期間：2020～2021

課題番号：20K22384

研究課題名（和文）4H-SiCパワーデバイス用転位動力学シミュレータの開発

研究課題名（英文）Development of dislocation dynamics simulator for 4H-SiC power devices

研究代表者

榊間 大輝（Hiroki, Sakakima）

東京大学・大学院工学系研究科（工学部）・助教

研究者番号：50884194

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 1,900,000円

研究成果の概要（和文）：次世代デバイスとして期待されている4H-SiCパワーデバイスでは、動作中に積層欠陥が拡大する事により性能が劣化する現象が問題となっている。本研究では、順方向劣化現象へ応力が与える影響のモデリング、これまでに考慮されていなかったファンデルワールス力を考慮した積層欠陥エネルギーの理論的算出に取り組み、順方向劣化現象へ応力が与える影響が概ね理論予測可能である一方で、その詳細なモデリングには依然として課題があることがわかった。

研究成果の学術的意義や社会的意義

近年の省エネルギー化への需要の急激な増加を受け、SiCパワーデバイスについても需要が急激に拡大しており、デバイスの高信頼性化へ向けた研究の社会的意義は高い。特に本研究で実施した、順方向劣化現象へ応力が与える影響のモデリングやファンデルワールス力を考慮した結晶特性の算出はこれまでにあまり注力した報告がなされていなかった分野であり、本研究で報告された成果は、今後のSiCデバイスの進化、高信頼性化にとって重要な技術、知見であると考えられる。

研究成果の概要（英文）：4H-SiC power devices, which are expected as next-generation devices, are facing a problem of performance degradation due to the expansion of stacking faults during operation. In this study, we have modelled the effect of mechanical stress on the forward voltage degradation phenomenon and conducted the theoretical calculation of the stacking fault energy considering van der Waals forces, which have not been taken into account. While the effects of stress on forward degradation can be predicted theoretically, detailed quantitative modeling of the phenomena still remains a challenge.

研究分野：材料力学、材料シミュレーション

キーワード：SiC 積層欠陥 ファンデルワールス力

## 1. 研究開始当初の背景

炭化ケイ素 (SiC) 半導体は、高耐圧・低損失・高温動作を可能とする次世代パワーデバイス用材料として注目されているが、Si デバイスの動作範囲を超えた領域への適用を実現する SiC-pin ダイオードなどのバイポーラデバイスの実用化には課題を抱えている。これは、順方向動作中に電気特性が急激に劣化し損失の増大や火災に繋がる「順方向劣化現象」と呼ばれる特異な現象が原因である。この現象は、電気的な抵抗領域となる積層欠陥がデバイス動作中に急速に拡大していくことが原因である。この積層欠陥の急速な拡大は、デバイス動作によって励起される正孔と電子の再結合によって積層欠陥端の部分転位のすべり運動が活性化される再結合促進転位すべり (REDG) と、積層欠陥に電子が捕獲されることによって電気的なエネルギーの低下が生じる量子井戸効果 (QWA) の 2 つの現象が組み合わせることにより引き起こされると考えられている<sup>1</sup>。そのため、一般的に転位の駆動力である分解せん断応力を加えることにより、積層欠陥拡大は、電気的なエネルギー低下、積層欠陥エネルギー、分解せん断応力の 3 つの要素に基づいて理論モデリングが可能であると考えられている。これらの要素の個別検討は近年実現されてきたが、これらを統合して一体的に扱うモデリングは実現されていない。

## 2. 研究の目的

本研究では、弾性論に基づいて転位の挙動を予測する従来の転位動力学シミュレーション技術を基盤に、順方向劣化現象特有の電気・温度に依存するモデリングを導入することにより、電気・熱・応力の影響を一体的に取り扱う事のできる解析手法の提案を目指している。

## 3. 研究の方法

本研究では当初、研究目的達成のための具体的な目標として①順方向劣化現象への応力の影響のモデリング、②4H-SiC に適用可能な転位動力学シミュレータの開発、③電気・熱の影響の転位動力学シミュレータへの導入の 3 段階を設定していた。目標①に対しては、共同研究先との協力のもと、実験による積層欠陥拡大条件の測定、有限要素法による応力解析、デバイスシミュレーション (TCAD) による電気特性の解析を活用した理論的なモデリングを実施した。一方で、研究の進行途中において使用を検討していた SiC 原子間ポテンシャルに課題が見つかった他、研究初年度に他の研究者から報告されたされた実験に基づく積層欠陥エネルギーの推定結果<sup>2</sup>と我々のモデリングの前提としてた第一原理計算に基づく計算結果に差異があったことから、第一原理計算を用いた積層欠陥エネルギーの算出について再検討を行った。

## 4. 研究成果

### (1) 順方向劣化現象への応力の影響のモデリング

申請時に進行していた研究結果に基づき、有限要素法、第一原理計算、デバイスシミュレーションを組み合わせた解析手法を構築し、SiC pin-Diode の積層欠陥拡大現象へ応力が与える影響の定量化に活用した。4 点曲げ実験による積層欠陥拡大閾値電流密度の応力依存性の測定結果<sup>3</sup>を元に解析を行い、積層欠陥拡大の基準となる臨界少数キャリア密度の分解せん断応力への依存性は概ね線形で近似可能で、その勾配は理論と実験で概ね一致するものであった。このことから、応力による臨界少数キャリア密度の変動は、転位論と QWA を組み合わせたエネルギーモデルよりモデル化可能であると考えられる。

(2) van der Waals (vdW) 相互作用を考慮した第一原理計算に基づく積層欠陥エネルギーの算出

本研究ではまず、SiC の結晶多形を対象に安定性および積層欠陥エネルギーの用いるファンデルワールス補正手法への依存性について比較検討を行った。比較結果を図 1

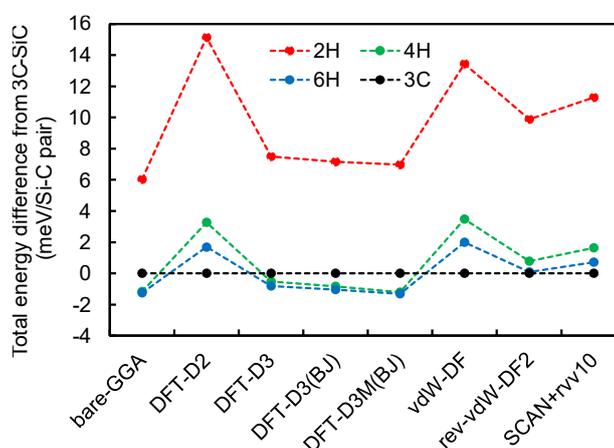


図 1 異なる vdW 補正を用いて求めた、2H-3C、4H-6H-SiC の全エネルギーの比較。ただし、3C-SiC を基準とした差分を示す。

に示す。多くの補正手法が実験と一致する  $3C < 4H$  の構造安定性を再現可能である一方で、従来用いられている vdW 補正無しの計算や半経験的補正として広く用いられている DFT-D3 法を用いた計算では実験と安定性順序が異なる結果が得られることがわかった。先行研究<sup>4</sup>において、SiC 結晶の凝集エネルギーに対する vdW 効果の寄与の大きさは SiC 結晶の異方性の強さを示す指標となる Hexagonality を用いて整理可能であることが報告されている。そこで、本研究においても各手法について Hexagonality を用いて vdW の寄与を整理した。図 2 に示すように、DFT-D3 法では vdW エネルギーの Hexagonality への依存性が他の手法と比較し小さいことがわかった。DFT-D3 法は vdW エネルギーの Hexagonality への依存性を過小評価してしまうため、vdW 補正を行わない (bare-GGA) 計算結果からの補正が十分に行えず図 1 に示した通り結晶構造の安定性順序が実験と一致しなかったと考えられる。

各 vdW 補正手法を用いて積層欠陥エネルギーを算出した結果を表 1 に示す。SiC 結晶に積層欠陥を挿入することによって局所的な Hexagonality が変化する場合にはのみ vdW 相互作用が積層欠陥エネルギーに大きな影響を与えることがわかった。また、vdW 補正の効果を高精度に考慮可能とされる SCAN+rvc10 法を用いることで、複数の実験結果と一致することがわかった。また、vdW 相互作用を考慮した場合、4H-SiC のダブルショックレー型積層欠陥 (DSSF) の積層欠陥エネルギーが負であることを明らかにした。これは、積層欠陥エネルギーが正であることを前提としていた積層欠陥の自発的拡大に関するエネルギーモデルと矛盾ため、従来の理論モデルに修正を加える必要がある可能性を示唆している。以上の課題により、本期間では当初目標としてた転位動力学を用いた統合モデリングまでは到達できなかった。本成果を踏まえたさらなる電気・熱・応力の影響を一体的モデリングについては、今後の課題である。

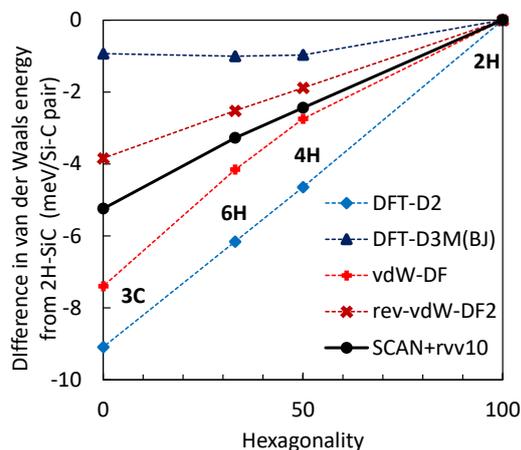


図 2 異なる vdW 補正手法を用いて求めた、vdW エネルギーの Hexagonality 依存性。ただし、2H-SiC を基準とした差分を示す。

表 1. 異なる vdW 補正手法を用いて求めた積層欠陥エネルギー ( $\text{mJ/m}^2$ ) .

	4H-SiC		3C-SiC		6H-SiC
	SSSF	DSSF	ISF	ESF	SSSF
Does hexagonality change?	No.	Yes.	Yes.	Yes.	No.
bare-GGA	15.41	7.50	8.38	-10.51	2.57
DFT-D2	15.50	-26.66	43.36	24.02	2.69
DFT-D3	15.80	2.52	13.80	-5.55	2.61
rev-vdW-DF2	15.34	-7.51	23.54	4.89	2.52
SCAN+rvc10	16.19	-12.82	31.09	12.59	2.78
experiment	14.7 <sup>5</sup> (at 1300 °C)	N. A.	34 <sup>6</sup>	N. A.	2.9 <sup>5</sup>

<引用文献>

<sup>1</sup> K. Maeda, in *Mater. Reliab. Handb. Semicond. Opt. Electron Devices*, edited by O. Ueda and S.J. Pearton (Springer New York, New York, NY, 2013), pp. 263–281.

<sup>2</sup> K. Maeda, K. Murata, I. Kamata, and H. Tsuchida, *Appl. Phys. Express* **14**, 044001 (2021).

<sup>3</sup> A. Goryu, A. Kano, M. Kato, C. Ota, A. Okada, J. Nishio, S. Izumi, and K. Hirohata, *Mater. Sci. Forum* **963**, 288 (2019).

<sup>4</sup> S. Kawanishi and T. Mizoguchi, *J. Appl. Phys.* **119**, 175101 (2016).

<sup>5</sup> M.H. Hong, A. V. Samant, and P. Pirouz, *Philos. Mag. A* **80**, 919 (2000).

<sup>6</sup> X.G. Ning and H.Q. Ye, *J. Phys. Condens. Matter* **2**, 10223 (1990).

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計3件（うち査読付論文 3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 Sakakima Hiroki, Hatano Asuka, Izumi Satoshi	4. 巻 130
2. 論文標題 Comparative study of the effect of van der Waals interactions on stacking fault energies in SiC	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 215701 ~ 215701
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0073402	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 -

1. 著者名 Sakakima Hiroki, Goryu Akihiro, Kano Akira, Hatano Asuka, Hirohata Kenji, Izumi Satoshi	4. 巻 128
2. 論文標題 Modeling the effect of mechanical stress on bipolar degradation in 4H-SiC power devices	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 025701 ~ 025701
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0010648	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1件（うち招待講演 0件／うち国際学会 0件）

1. 発表者名 榎間 大輝, 波田野 明日可, 泉 聡志
2. 発表標題 SiC結晶の積層欠陥エネルギーにファンデルワールス相互作用が与える影響の検討
3. 学会等名 第82回応用物理学会 秋季学術講演会
4. 発表年 2021年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

Izumi & Hatano Lab.  
<https://www.fml.t.u-tokyo.ac.jp/research.html>

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
--	---------------------------	-----------------------	----

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
---------	---------