

修士論文

4H-SiC パワーデバイスの
電気特性評価にむけた応力解析技術の確立

平成 28 年 2 月 4 日提出

東京大学大学院 工学系研究科 機械工学専攻

37-146235 村上陽一

指導教員 酒井 信介 教授

目次

図一覧.....	5
表一覧.....	7
第1章 序論.....	8
1.1 研究背景.....	8
1.1.1 炭化ケイ素(SiC)とは.....	8
1.1.2 SiC の課題.....	10
1.2 本研究の目的.....	12
1.3 本論文の構成.....	13
第2章 ラマン分光法による デバイス評価.....	14
2.1 緒言.....	14
2.2 ラマン分光法の概説.....	14
2.2.1 ラマン分光測定.....	14
2.2.2 ラマン分光法と応力.....	17
2.2.3 ラマンスペクトルの半値幅.....	18
2.3 4H-SiC デバイス.....	19
2.4 ラマン分光測定.....	22
2.4.1 測定条件.....	22
2.4.2 測定結果.....	25
第3章 第一原理計算による フォノン変形ポテンシャル係数の算出.....	30
3.1 緒言.....	30
3.1 第一原理計算.....	30
3.2 計算条件.....	33
3.3 解析結果.....	35
3.3.1 無応力状態.....	35
3.3.2 一軸応力.....	37
3.3.3 三軸等方応力.....	41
3.3.4 二軸等方応力.....	43
3.3.5 二軸異方応力.....	47

3.3.6	せん断応力.....	51
3.4	妥当性の評価.....	57
3.4.1	弾性定数の比較.....	57
3.4.2	フォノン変形ポテンシャル係数の比較.....	58
第4章	有限要素法による デバイス内部の応力評価.....	59
4.1	緒言.....	59
4.2	解析の説明.....	59
4.3	妥当性の評価.....	60
4.3.1	ラマンシフトの応力分布からの算出方法.....	60
4.3.2	サンプリング点における応力の内挿.....	62
4.4	解析条件.....	63
4.5	多段階熱応力解析.....	68
4.6	解析結果.....	70
第5章	結論.....	77
5.1	結論.....	77
5.2	今後の展望.....	78
付録A	：四点曲げ解析.....	79
A.1	緒言.....	79
A.2	四点曲げ試験の概要.....	79
A.3	解析条件.....	81
A.4	解析結果.....	83
A.5	ズーム解析例.....	85
A.5.1	縦条件.....	85
A.5.2	横条件.....	86
付録B	：デバイスシミュレーションによる電気特性変動評価.....	87
B.1	緒言.....	87
B.2	使用モデル.....	87
B.2.1	基本方程式.....	87
B.2.2	移動度モデル.....	88
B.2.3	キャリア生成・再結合モデル.....	88
B.3	解析モデル.....	92
参考文献	94

謝辞.....98

図一覽

FIG 1. LAYERED STRUCTURE OF SiC POLYTYPE[1]	9
FIG 2. RELATIONSHIP BETWEEN STRESS AND GM CHANGE OF Si MOSFET[4].	11
FIG 3. MECHANISM OF RAMAN SCATTERING.	15
FIG 4. PHONON DISPERSION CURVES OF 4H-SiC[5]	16
FIG 5. 4H-SiC RAMAN SPECTRUM[7].	16
FIG 6. RELATIONSHIP BETWEEN STRESS AND RAMAN SHIFT.	18
FIG 7. APPEARANCE OF SiC MOSFET[10].	20
FIG 8. ELECTRON MICROGRAPHY OF MOSFET.	20
FIG 9. SCANNING CAPACITANCE MICROSCOPY IMAGE OF MOSFET.	21
FIG 10. DIAGRAM OF SiC MOSFET.	21
FIG 11. SiC DEVICE CUTTING POSITION.	23
FIG 12. ABSORPTION CORVES OF N-TYPE 4H-SiC CRYSTALS FOR POLARIZATION OF LIGHT PARALLEL-PERPENDICULAR TO THE C-AXIS OF CRYSTALS[12].	24
FIG 13. SiC MOSFET CROSS SECTION AND MEASUREMENT AREA.	24
FIG 14. MEASURED RAMAN SPECTRUM.	26
FIG 15. EXAMPLE OF FITTING RAMAN SPECTRUM.	26
FIG 16. A1(0) MODE (A)RAMAN SHIFT AND (B)HALF WIDTH DISTRIBUTION.	27
FIG 17. E1(0) MODE (A)RAMAN SHIFT AND (B)HALF WIDTH DISTRIBUTION.	28
FIG 18. E2(2/4) MODE (A)RAMAN SHIFT AND (B)HALF WIDTH DISTRIBUTION.	29
FIG 19. 4H-SiC LAYERED STRUCTURE.	31
FIG 20. 4H-SiC UNIT CELL.	32
FIG 21. CALCULATED RAMAN SHIFT AND LINEAR APPROXIMATION UNDER UNIAXIAL STRESS σ_x	38
FIG 22. CALCULATED RAMAN SHIFT AND LINEAR APPROXIMATION UNDER UNIAXIAL STRESS σ_y	39
FIG 23. CALCULATED RAMAN SHIFT AND LINEAR APPROXIMATION UNDER UNIAXIAL STRESS σ_z	40
FIG 24. CALCULATED RAMAN SHIFT AND (3.2) MODEL UNDER TRIAXIAL STRESS.	42
FIG 25. CALCULATED RAMAN SHIFT AND (3.2) MODEL UNDER BIAXIAL ISOTROPIC STRESS σ_x, σ_y	44
FIG 26. CALCULATED RAMAN SHIFT AND (3.2) MODEL UNDER BIAXIAL ISOTROPIC STRESS σ_x, σ_z	45
FIG 27. CALCULATED RAMAN SHIFT AND (3.2) MODEL UNDER BIAXIAL ISOTROPIC STRESS σ_y, σ_z	46
FIG 28. CALCULATED RAMAN SHIFT AND (3.2) MODEL UNDER BIAXIAL ANISOTROPIC STRESS σ_x, σ_y	48
FIG 29. CALCULATED RAMAN SHIFT AND (3.2) MODEL UNDER BIAXIAL ANISOTROPIC STRESS σ_x, σ_z	49
FIG 30. CALCULATED RAMAN SHIFT AND (3.2) MODEL UNDER BIAXIAL ANISOTROPIC STRESS σ_y, σ_z	50
FIG 31. UNIT CELL DEFORMATION CAUSED BY SHEAR STRESS τ_{xy}	51
FIG 32. CALCULATED RAMAN SHIFT AND (3.3) MODEL UNDER SHEAR STRESS τ_{xy}	52

FIG 33. CALCULATED RAMAN SHIFT UNDER SHEAR STRESS τ_{xz}	54
FIG 34. CALCULATED RAMAN SHIFT UNDER SHEAR STRESS τ_{yz}	55
FIG 35. CALCULATED RAMAN SHIFT UNDER SHEAR STRESS $\tau_{xz} = \tau_{yz}$	56
FIG 36. COMPARISON OF 3C-SiC MEASURED VALUE AND CALCULATED VALUE.....	58
FIG 37. POSITION OF SAMPLING POINTS IN LASER SPOT.....	61
FIG 38. NORMALIZED INTENSITY DISTRIBUTION OF LAZER BEAM SPOT.....	61
FIG 39. DIAGRAM OF ELEMENT AND NODES.....	63
FIG 40. FE MODEL OF MOS DEVICE.....	64
FIG 41. DETAIL FE MODEL OF MOS DEVICE.....	65
FIG 42. TOP VIEW AND BOUNDARY CONDITIONS.....	65
FIG 43. THERMAL EXPANSION COEFFICIENT OF SiC[19].....	66
FIG 44. THERMAL EXPANSION COEFFICIENT OF Al[20].....	66
FIG 45. THERMAL EXPANSION COEFFICIENT OF SiO ₂ [20].....	67
FIG 46. THERMAL EXPANSION COEFFICIENT OF SiN AND POLYSi[20].....	67
FIG 47. PROCESS FLOW OF SiC MOSFET.....	69
FIG 48. MAXIMUM PRINCIPAL STRESS OF EACH ANALYSIS STEP.....	71
FIG 49. MINIMUM PRINCIPAL STRESS OF EACH ANALYSIS STEP.....	72
FIG 50. COVALENT RADIUS OF SiC / IMPURITY.....	73
FIG 51. SiC / IMPURITY CONCENTRATION.....	73
FIG 52. RESIDUAL STRESS (A)MAXIMUM PRINCIPAL STRESS (B)MINIMUM PRINCIPAL STRESS.....	75
FIG 53. RAMAN SHIFT DISTRIBUTION (CAL) CALCULATION (EXP) EXPERIMENTS.....	76
FIG 54. FOUR-POINT BENDING MACHINE.....	80
FIG 55. FOUR-POINT BENDING SPECIMEN.....	80
FIG 56. LONGITUDINAL CONDITION FE MODEL OF FOUR-POINT BENDING (A)TOP VIEW (B)SIDE VIEW.....	82
FIG 57. LATERAL CONDITION FE MODEL OF FOUR-POINT BENDING (A)TOP VIEW (B)SIDE VIEW.....	82
FIG 58. RELATIONSHIP BETWEEN STRAIN ON GAUGE AND STRAIN ON SiC CHIP.....	84
FIG 59. STRESS DISTRIBUTION CONSIDERING FOUR-POINT BENDING STRAIN (LONGITUDINAL CONDITION).....	85
FIG 60. STRESS DISTRIBUTION CONSIDERING FOUR-POINT BENDING STRAIN (LATERAL CONDITION).....	86
FIG 61. DEVICE SIMULATION MODEL OF SiC MOSFET.....	93
FIG 62. MESH OF THE MOS.....	93

表一覽

TABLE 1. PHYSICAL PROPERTIES AND TECHNOLOGY STATUS OF MAJOR SEMICONDUCTOR MATERIALS[1].....	8
TABLE 2. PHYSICAL PROPERTIES OF SiC POLYTYPE[1].....	9
TABLE 3. APPROACH OF THIS PAPER.	12
TABLE 4. 4H-SiC RAMAN FREQUENCIES (CM ⁻¹) [5], [6].....	15
TABLE 5. ELECTRIC CHARACTERISTICS OF CREE-SiC MOSFET[10].....	19
TABLE 6. RAMAN SPECTROMETRY CONDITION.	23
TABLE 7. FIRST-PRINCIPLES CALCULATION PROCEDURE.	32
TABLE 8. CONDITION OF FIRST-PRINCIPLES CALCULATION.....	33
TABLE 9. STRESS CONDITION OF CALCULATION.	34
TABLE 10. ANALYSIS RESULTS OF 4H-SiC PHONON MODE.	36
TABLE 11. ELASTIC COEFFICIENTS OF 4H-SiC.	57
TABLE 12. ELASTIC COEFFICIENT OF MATERIALS.	66
TABLE 13. ANALYSIS CONDITION.....	67
TABLE 14. FORMATION TEMPERATURE OF MATERIALS.	68
TABLE 15. PHYSICAL PROPERTIES OF MATERIALS USED IN FOUR-POINT BENDING CALCULATION.	81
TABLE 16. MODEL PARAMETERS FOR SiC DEVICE SIMULATION.	90
TABLE 17. DEVICE SIMULATION MODEL CONDITION.	92

第1章 序論

1.1 研究背景

1.1.1 炭化ケイ素(SiC)とは

電気エネルギーは現在あらゆる場面において利用されており，人々の生活になくてはならないものとなっている．その電気を制御するために半導体は不可欠であり，近年の情報化社会の中で半導体産業はムーアの法則にしたがって急速な発展を遂げてきた．現在まで主にシリコンを用いた半導体が開発されてきたが，近年の半導体素子の微細化，高集積化は激しく，性能改善は物性的に限界に近づいてきており，シリコンに代わる新たな材料を用いた半導体デバイスが期待されている．その中で炭化ケイ素（SiC）はシリコンと比較してバンドギャップや絶縁破壊強度，電子飽和速度，熱伝導率などの物性が電力用半導体装置（以下，パワーデバイス）への利用に適したものであり[1]，期待を集めている．Table 1 に主な半導体材料の物性値，性能指標及び技術の現状を示す．SiC を用いたパワーデバイスはその物性から Si と比較して高速動作，高温動作，低オン抵抗，高耐圧，高密度といった利点があり，従来のパワーデバイスと比較してシステムの簡略化や省エネルギー化が達成できると考えられている．実際に 2014 年の 4 月には鉄道の小田急車両へのインバータへの導入がされるなど実用化も進んでいる．

Table 1. Physical properties and technology status of major semiconductor materials[1]

	4H-SiC	Si	GaAs	GaN	ダイヤモンド
禁制帯幅 (eV)	3.26	1.12	1.42	3.42	5.47
電子移動度 (cm ² /Vs)	1000	1350	8500	1500	2000
絶縁破壊電界強度 (MV/cm)	2.8	0.3	0.4	3	8
飽和ドリフト速度 (cm/s)	2.2×10 ⁷	1.0×10 ⁷	1.0×10 ⁷	2.4×10 ⁷	2.5×10 ⁷
熱伝導率 (W/cmK)	4.9	1.5	0.46	1.3	20
Johnson の性能指標	420	1	1.8	580	4400
Baliga の性能指標	470	1	15	850	13000
p 型価電子制御	○	○	○	△	○
n 型価電子制御	○	○	○	○	×
熱酸化	○	○	×	×	×
低抵抗ウエハ	○	○	○	△ (SiC, GaN)	×
絶縁性ウエハ	○	△ (SOI)	○	△ (サファイヤ)	×
ヘテロ接合	×	×	○	○	×

○：容易あるいは入手可能，△：可能だが限定される，×：困難

SiCはシリコン原子 Si と炭素原子 C の二種類の原子からなり、その積み重なる層の順序の違いから 200 種類以上の多くの結晶多形（ポリタイプ）を持つ。Fig 1 に SiC の代表的なポリタイプである 3C-, 4H-, 6H-の積層構造の模式図を、Table 2 にそれぞれの物理的特性を示す[1]。3C-SiC は立方晶であり等方材料であるのに対し、4H-SiC および 6H-SiC は六方晶であり異方性材料であることに注意が必要である。同図における縦方向が積層方向（c 軸方向）となっており、積層される層の順序によって物性値が異なる。このうち禁制帯幅や移動度、絶縁破壊強度が他のポリタイプと比べて大きい材料であることなどから、パワーデバイスに最も適していると考えられるのは 4H-SiC である。本研究でも 4H-SiC を用いたパワーデバイスを対象とする。

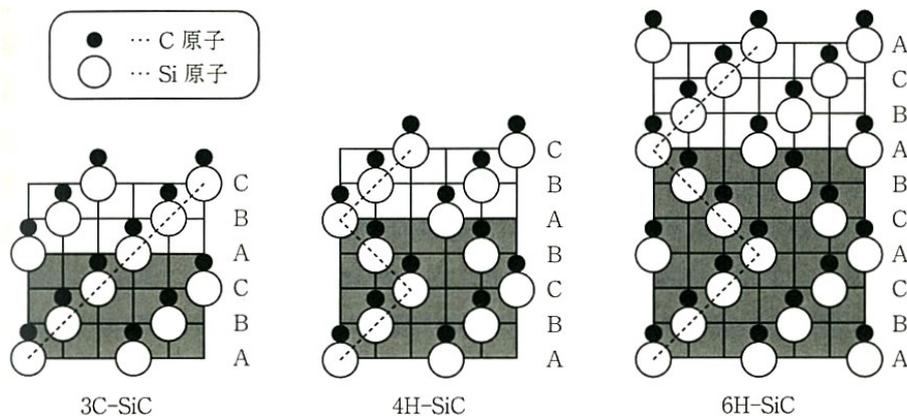


Fig 1. Layered structure of SiC polytype[1]

Table 2. Physical properties of SiC polytype[1].

	3C-SiC	4H-SiC	6H-SiC
積層構造	ABC	ABCB	ABCACB
格子定数 (Å)	4.36	a = 3.09 c = 10.08	a = 3.09 c = 15.12
禁制帯幅 (eV)	2.23	3.26	3.02
電子移動度 (cm ² /Vs)	1000	1000 (⊥c) 1200 (//c)	450 (⊥c) 100 (//c)
正孔移動度 (cm ² /Vs)	50	120	100
絶縁破壊電界強度 (MV/cm)	1.5	2.8	3.0
飽和ドリフト速度 (cm/s)	2.7 × 10 ⁷	2.2 × 10 ⁷	1.9 × 10 ⁷
熱伝導率 (W/cmK)	4.9	4.9	4.9
比誘電率	9.72	9.7 (⊥c) 10.2 (//c)	9.7 (⊥c) 10.2 (//c)

1.1.2 SiC の課題

本研究ではパワーデバイスとして nMOSFET を想定するが、材料として半導体材料である SiC, Si の他に Ni, Al といった金属材料が使用され、それぞれ実装温度や線膨張係数が異なる。そのため常温の状態デバイス内部に応力が生じるものとなり、この応力は熱応力と呼ばれる。また前述のとおり SiC は結晶多形が数多く存在し、ウェーハの製造時に積層欠陥や転位などが発生しやすく、その他にも半導体の製造過程でイオンのドーピングを行うことによる結晶欠陥から応力が発生する。この応力は真性応力と呼ばれる。また SiC パワーデバイスは禁制帯幅が広いこと Si よりも熱的に安定であり、Si と比べて高温化での運転も期待されている。高温となることで材料ごとの線膨張係数の差からデバイス内部の応力分布は変化する。Si における応力起因の電気特性変化は知られており[2]、同様に SiC パワーデバイスに対してもこれらの応力が電気特性に影響を与えると考えられる。デバイス内部の応力による電氣的性質の変化は耐電圧の低下や寿命の低下、損失の増大、動作不良といった問題が生じる可能性がある。そのため SiC デバイスを普及させる上で信頼性の評価と改善が必要とされている。また高圧・大電流を扱うパワーデバイスの損失を低減することはシステムの高効率化に直結するものである。

SiC パワーデバイス内部の応力の測定方法として、Kosaka によりラマン分光法による評価が報告されている[3]。本研究ではラマン分光法をもちいて応力の評価を行う。しかし、4H-SiC に関するラマン分光測定によって取得されるラマンシフトと応力の関係は報告が少なく先行研究においては Si の値を用いて評価を行っており、取得される応力も成分としてではなく一軸応力や二軸等方応力といった仮定のもとで算出される定性的なものである。したがって、本研究では第一原理計算ソフト PHASE/0 を用いて応力によって結晶格子に生じるひずみと結晶の振動モードの変化から、4H-SiC のラマンシフトと応力の変換に必要な係数であるフォノン変形ポテンシャル係数を求めるものとする。しかし、ラマン分光法による測定はコストと時間がかかるものであり、全てのデバイスに対して行えるものではない。また電流抵抗などの電気特性はひずみの生じる方向と電流の流れる方向によって傾向が大きく変わるため、各方向の応力成分の算出が求められている。この点を補う方法として有限要素法による応力解析が有用である。本研究では汎用有限要素法解析ソフト ANSYS による有限要素法解析によりデバイス内部の応力を解析・評価する。

SiC デバイスの電気特性は四点曲げによりデバイスに応力を印加しドレイン電圧-ドレイン電流の関係を取得する実験が東芝によって行われた。電気特性の解析は TCAD ソフトである HyENEXSS を用いたデバイスシミュレーションを想定する。先行研究として、Koganemaru は Si デバイス内部の応力と電気特性の関係を実験とシミュレーションを用いて評価している[4]。Fig 2 に Koganemaru によって得られた Si の相互コンダクタンス変化率と応力依存性の関係を示す。ここで相互コンダクタンスとはゲート電圧の

増分に対するドレイン電流の比であり、ゲートに電圧をかけた際にどの程度電流が流れるかを示す値である。Fig 2において応力による相互コンダクタンスの変化率はSi MOSFETに対してであるが、デバイスシミュレーションと実験でよく一致している。対して、SiCデバイスの応力に起因した電気特性変動をデバイスシミュレーションによって評価する研究は他に見られない。本研究ではSiCに対するデバイスシミュレーションによる電気特性の応力依存性評価を行うために必要である、デバイス内部の微細な応力分布を評価することを目指す。デバイス内部の応力の評価手法を確立することで、得られた応力分布をデバイスシミュレーションに導入することによってデバイス製造時やデバイスの使用温度変更時に起因する応力がデバイスの電気特性に与える影響をシミュレーションにより評価することが可能となる。最終的に東芝によるデバイスシミュレーションにより応力起因の移動度の変化を実験によって得られた値への合わせこむことによって、シミュレーションによるSiCデバイス評価手法を確立する。

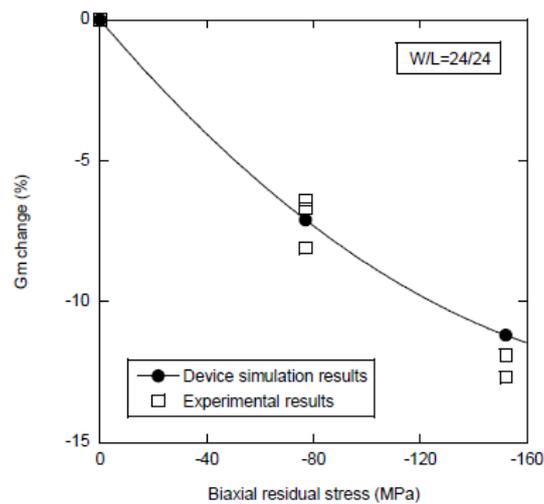


Fig 2. Relationship between stress and Gm change of Si MOSFET[4].

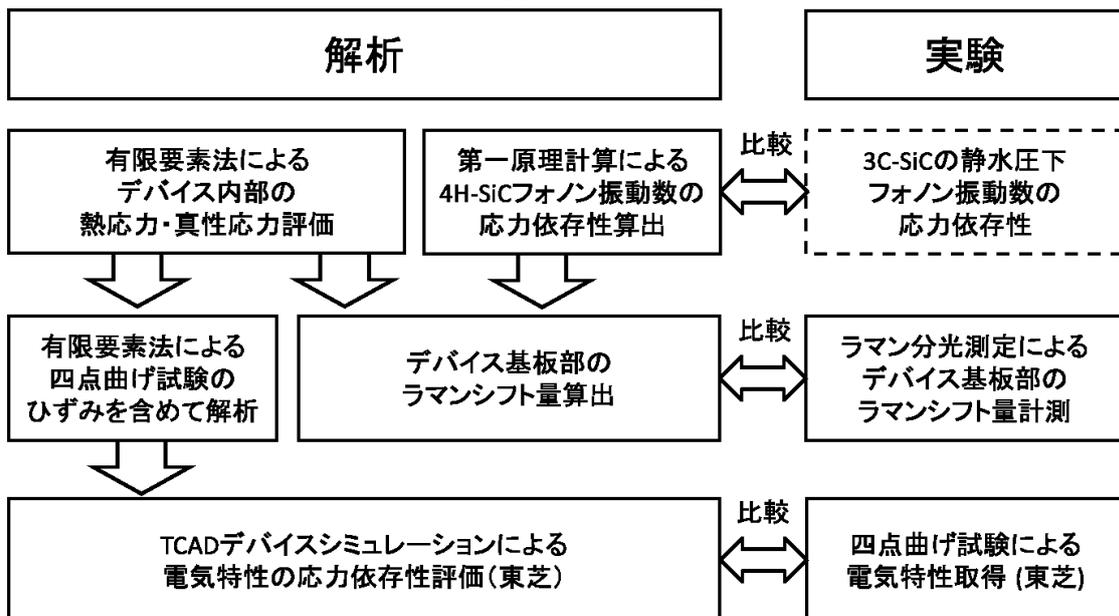
1.2 本研究の目的

本論文では、上で述べたような研究背景から、SiC パワーデバイスの内部に生じる応力を実験とシミュレーションによって計測・評価することで、SiC デバイスの電気特性を解析するために必要な応力評価技術の確立を目的とする。

ラマン分光測定による残留応力評価と、第一原理計算による 4H-SiC のフォノン変形ポテンシャル係数算出、有限要素法によるデバイス内部の残留応力評価を組み合わせる。以下に本研究の目的と行うことを示し、Table 3 に本研究の位置づけを示す。

- 1) 応力測定のために、ラマン分光測定により SiC MOSFET デバイス内部のラマンシフトを測定し、応力の傾向を評価する。
- 2) ラマンシフトによる応力の定量的な評価および有限要素法解析結果のラマンシフトとの比較のために、第一原理計算を用いて未知の物性値であるフォノン変形ポテンシャルを求める。
- 3) デバイスシミュレーションに必要な応力成分を取得するために有限要素法解析によりデバイス内部の残留応力を評価する。解析では製造プロセスを再現するために多段階熱応力解析を行う。2)の変換係数を用いて、有限要素法による残留応力から、ラマン分光測定により計測されると考えられるラマンシフトを算出し、ラマン分光測定によるラマンシフトとの比較評価を行う。

Table 3. Approach of this paper.



1.3 本論文の構成

本論文は、本章を含めて全第 5 章で構成される。以下に各章の概要を述べる。

第 1 章では、本研究の背景、対象とするデバイス、本研究の目的、本論文の構成について述べた。

第 2 章では、ラマン分光法の説明および測定条件・結果を示す。また本研究で対象とする SiC MOSFET デバイスの説明を行う。

第 3 章では、本研究で行った第一原理計算を用いた応力に起因するラマンシフト解析についても説明し、SiC デバイス内部の応力に対する評価を行う。

第 4 章では、有限要素法を用いた SiC デバイス内部の残留応力解析について説明する。また、第 3 章において算出された応力との比較評価・考察も行う。四点曲げ試験の概要と試験により発生する応力分布の予測を行う。

第 5 章では本研究の結論と今後の展望を述べる。

第2章 ラマン分光法による デバイス評価

2.1 緒言

SiC MOSFET デバイスの電気特性の応力依存性を解析するために必要なデバイス内部の応力分布を得るために内部の応力を実験によって評価する必要がある。これは複雑なデバイス内部の応力を解析のみによって求めることは不可能であり、応力分布を有限要素法解析などによって算出するためには、解析結果を実験結果と比較することによって妥当性を確認している必要があるためである。本章では、デバイス内部の応力評価に用いたラマン分光法の説明を行う。その後、東レによって得られた計測結果を示し、考察を行う。

2.2 ラマン分光法の概説

2.2.1 ラマン分光測定

本研究ではデバイス内部の応力評価にラマン分光法を用いた。物質に励起光を照射した際に反射、屈折、吸収、散乱の4現象により光が生じる。この内、散乱によって生じる光には、励起光と同じ波長であるレイリー散乱光と、励起光と異なる波長であるラマン散乱光がある。ラマン分光法は、このラマン散乱光を分光し得られたラマンスペクトルから構造を解析するものである。ラマン散乱光は格子振動によって生じるため、ラマン散乱光と励起光の振動数の差は分子の振動数と等しい。Fig 3 にラマン散乱のモデル図を示す。ラマン散乱光には低い振動数であるストークス散乱と高い振動数であるアンチストークス散乱が含まれるが、一般的により強度の大きいストークス散乱を用いて構造解析を行う。ラマン分光法の空間分解能は照射するレーザー励起光のスポット径の大きさに依存するが、 $1\mu\text{m}$ 以下で測定が可能とされており、Siよりも比較的大きいマイクロメートルオーダーのサイズとなるSiCデバイスの解析への応用が期待される。

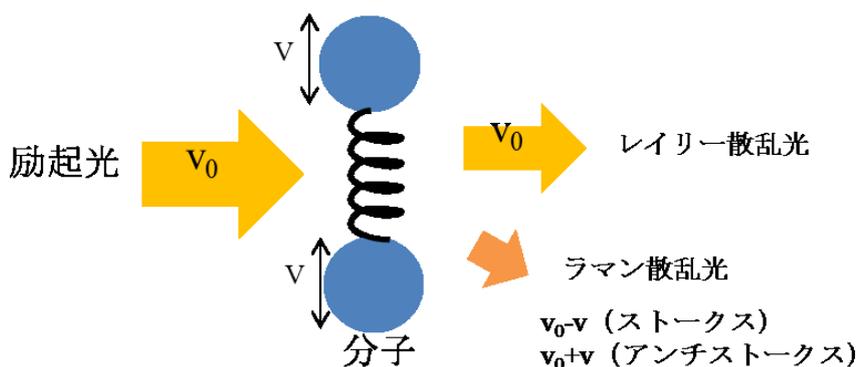


Fig 3. Mechanism of raman scattering.

ラマン分光法は励起光の入射する方向と偏光方向, 散乱光の進行方向と偏光方向によって取得されるラマン散乱光とそのスペクトルが異なる. Z 方向に進行する X 方向偏光の励起光を用いて -Z 方向に進行する Y 方向偏光の散乱光を検出する散乱配置を $Z(X, Y)\bar{Z}$ のように表す. Table 4 に Feldman と Nakashima によって測定されたラマン分光法によるフォノンモードの振動数を [5], [6], Fig 4 に測定されたフォノン振動数をもとにした 4H-SiC の c 軸方向のフォノン分散曲線を [5], Fig 5 にラマン分光法によって得られる 4H-SiC の各種散乱配置によるラマンスペクトルのサンプルを示す [7]. ここで, q は c 軸方向の波数ベクトル, $q_{\max} = \pi/a$ (a : c 軸方向の格子定数) であり, $x = q/q_{\max}$ である. Table 4 において F はラマン不活性で検出されないモードであり, 2 つある N.O. は測定されなかったモードである. ラマン分光法によって 4H-SiC はラマン不活性な B1 モードを除いた A1, E1, E2 モードのフォノンが観測され, Fig 5 に示すようにラマンスペクトルが計測される. A1 モードは c 軸と平行な方向の振動モードであり, E1, E2 モードは c 軸に垂直な方向の振動モードである.

Table 4. 4H-SiC Raman frequencies (cm^{-1}) [5], [6]

分枝	x=0	x=0.5	x=1
Axial optic	A1 964	-	A1 838
Planar optic	E1 796	E2 776 E2 N.O.	E1 N.O.
Axial acoustic	-	-	A1 610
Planar acoustic	-	E2 204 E2 196	E1 266

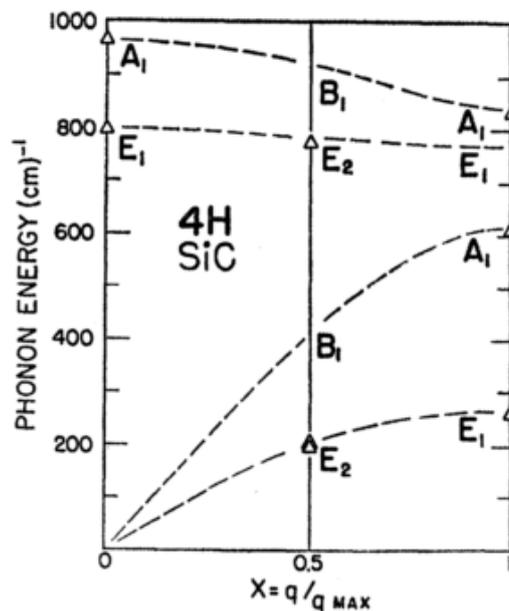


Fig 4. Phonon dispersion curves of 4H-SiC[5]

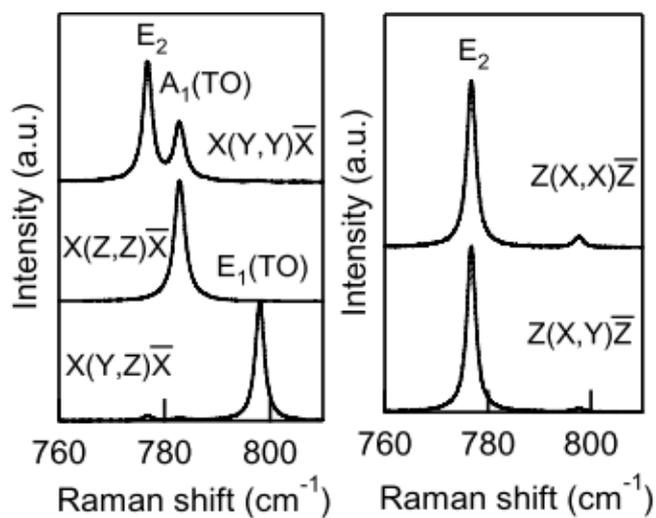


Fig 5. 4H-SiC raman spectrum[7].

2.2.2 ラマン分光法と応力

結晶構造に応力がかかり、ひずみが生じると原子間距離が変化する。一般に原子間に働く力は原子間距離の関数であるため、原子間距離に応じて原子間の結合力も変化する。格子振動の振動数は原子間の結合力によって変化する。したがって、応力によって格子振動の振動数は変化する。ゆえに応力がかかる前と後のラマンスペクトルの変化量を計測することによって、応力の値をラマンスペクトルから見積もることができる。本研究ではラマンスペクトルのシフトから応力を評価する。Fig 6 にラマンスペクトルと応力の関係のモデル図を示す。圧縮応力によってラマンスペクトルは高波数側に、引張応力によってラマンスペクトルは低波数側にシフトする。Briggs らによるとウルツ鉱型結晶の垂直応力 σ 、せん断応力 τ とフォノンの振動数変化の間に以下の関係が成り立つ[8]。

$$\begin{aligned}\Delta\omega_{A1} &= a_{A1}(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) + b_{A1}\sigma_{zz}, \\ \Delta\omega_{E1} &= a_{E1}(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) + b_{E1}\sigma_{zz} \\ &\quad \pm c_{E1}[(\sigma_{xx} - \sigma_{yy})^2 + 4\tau_{xy}^2]^{1/2}, \\ \Delta\omega_{E2} &= a_{E2}(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) + b_{E2}\sigma_{zz} \\ &\quad \pm c_{E2}[(\sigma_{xx} - \sigma_{yy})^2 + 4\tau_{xy}^2]^{1/2},\end{aligned}\tag{2.1}$$

ここで、 $a_i, b_i, c_i (i = A1, E1, E2)$ はフォノン振動数と応力の変換に必要な係数であり、本研究では第 3 章にて算出するものとする。また応力のせん断成分を無視するとフォノンの振動数は応力の線形結合によって表される。先行研究としてシリコン LSI に対してラマン分光法を用いて応力評価を行った報告があり[9]、本研究では SiC に対して行う。

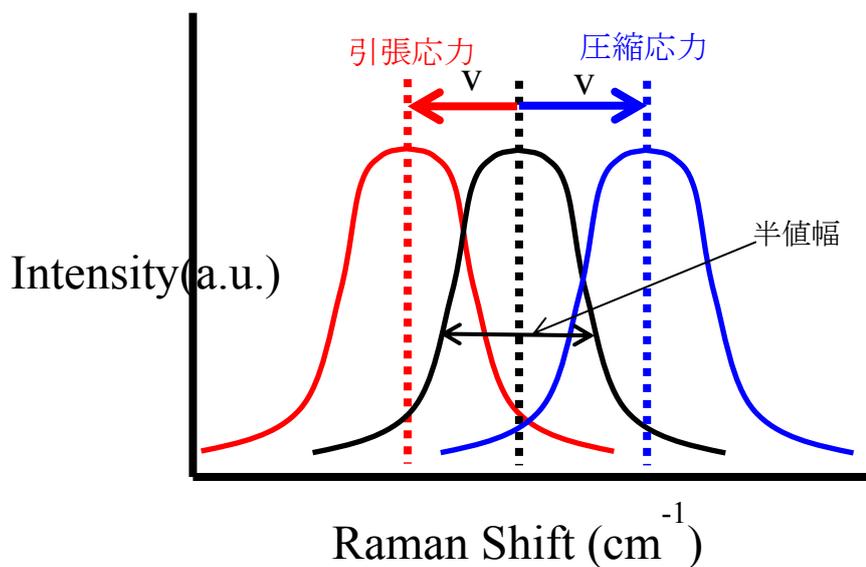


Fig 6. Relationship between stress and raman shift.

2.2.3 ラマンスペクトルの半値幅

ラマン分光測定によりスペクトルの強度が半分となるラマンシフトの幅である半値幅が計測される。半値幅を用いて結晶格子の結晶性を評価することができる。結晶性が悪いと半値幅は大きくなり、結晶性がいいと半値幅は小さくなる。そのためイオン注入量の評価に用いることができる。また応力の異方性についても評価できる。これは例えば無応力状態でx軸方向のひずみに応じて変化するフォノンモードとy軸方向のひずみに応じて変化するフォノンモードが縮退しているモードが存在するため、x軸とy軸に異なる応力がかかった際にピークが分裂し幅が広がるためである。

2.3 4H-SiC デバイス

本節では本研究においてラマン分光計測および有限要素法解析, デバイスシミュレーションを行うデバイスの説明を行う。

本研究では Cree 社製の n 型 SiC-MOSFET CPM2-1200-0025B を用いる。Fig 7 に MOSFET の外観を, Table 5 に主な性能を[10], Fig 8 に Fig 7 の y 軸に垂直な平面で切断した際のゲート絶縁体付近の断面の電子顕微鏡写真を, Fig 9 に走査型静電容量顕微鏡法 (Scanning Capacitance Microscopy, SCM)によるキャリア濃度分布図を, Fig 10 に, Fig 8 の電子顕微鏡断面図を元に作成したデバイスの模式図を示す。一辺が数ミリ程度の非常に小さなデバイスでありながら 1200V-90A の大電流を扱うことのできるパワーデバイスであり, また 100°Cを超える高温での運転も想定されている。Fig 8 に示すようにデバイスのソース電極とゲート電極は一組で 9.06 μm であり, 厚さが 180 μm 程度であることを考えると比較的微小な構造である。Fig 10 に示すようにデバイスの底面にドレイン電極が存在するが, ソースやゲートの長さに対してデバイスが厚いのは, デバイスの厚みによって耐電圧を高めることによって, 大きな電圧がかかった際の不具合や故障を防ぐためであり, SiC MOSFET よりも耐圧の低い Si を用いた Si MOSFET デバイスは SiC よりも厚いデバイスとなる。Fig 9 において青い部分はリン P などをドーピングすることによって形成される n 型半導体部分, 黄色い部分はアルミニウム Al やボロン B をドーピングすることによって形成される p 型半導体部分であり, 色が濃い部分ほど不純物濃度が高いことを示している。この半導体デバイス断面は y 軸方向には一様な形状をしている。パワーデバイスの仕組みとして, ゲートに電圧をかけていない状態ではソース電極とドレイン電極の間の npn 接合により通電しないが, ゲートにしきい値電圧を超える電圧をかけることによってゲート絶縁体である SiO₂ 界面にキャリアが集中し反転層が形成されることで, ソース-ドレイン間が導通して電流が流れるというものである。ゆえにスイッチとなるゲート酸化膜やソース電極と SiC の界面付近がデバイスの特性に大きな影響を与え, 非常に重要であるといえる。

Table 5. Electric characteristics of Cree-SiC MOSFET [10].

最大ドレイン-ソース電圧	1200V
最大ドレイン電流(連続)	90A(25°C) 60A(100°C)
オン抵抗	25m Ω
ゲートしきい値電圧	3.0V(25°C) 2.0V(150°C)

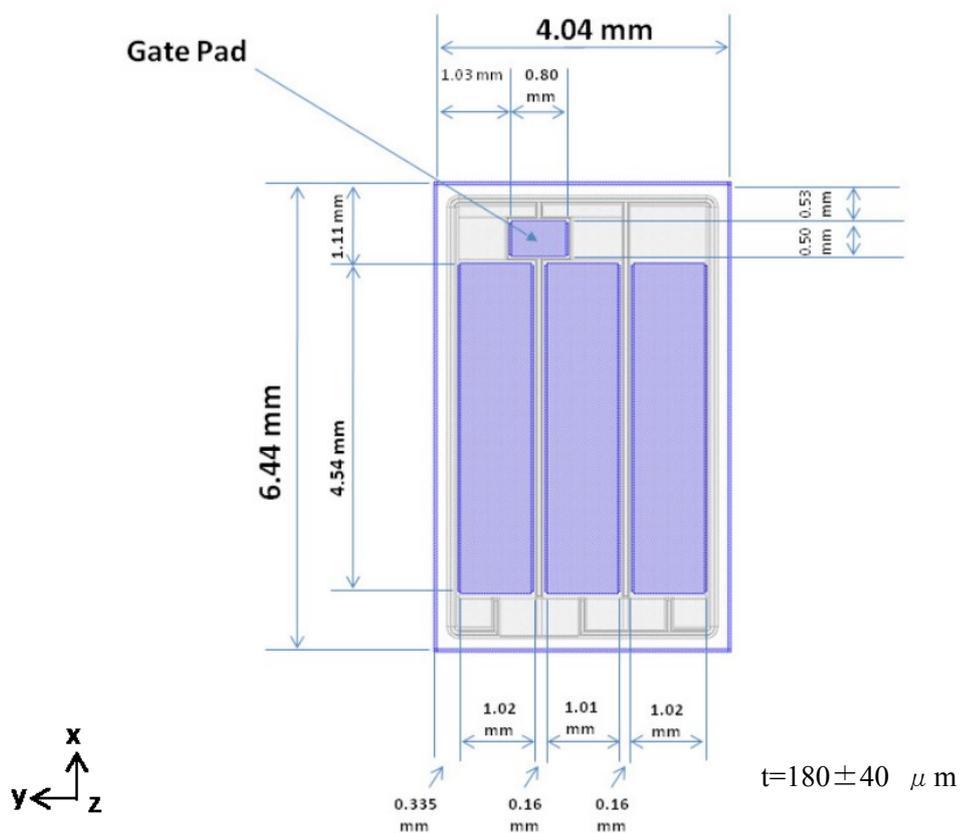


Fig 7. Appearance of SiC MOSFET[10].

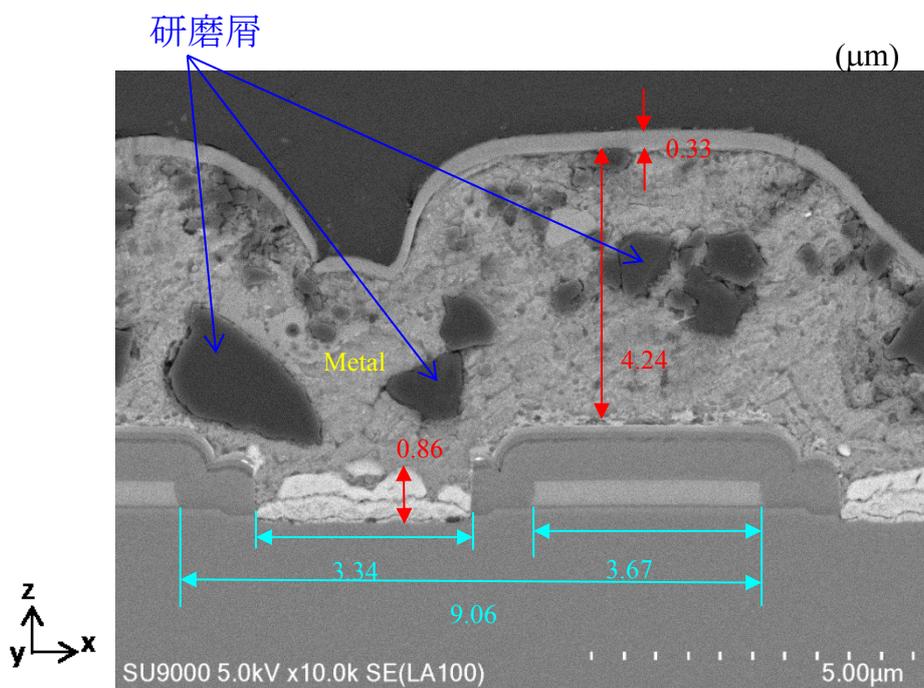


Fig 8. Electron micrography of MOSFET.

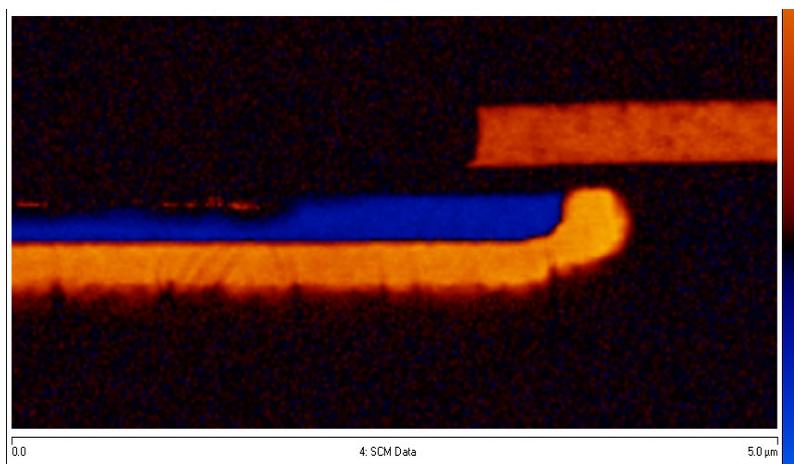


Fig 9. Scanning capacitance microscopy image of MOSFET.

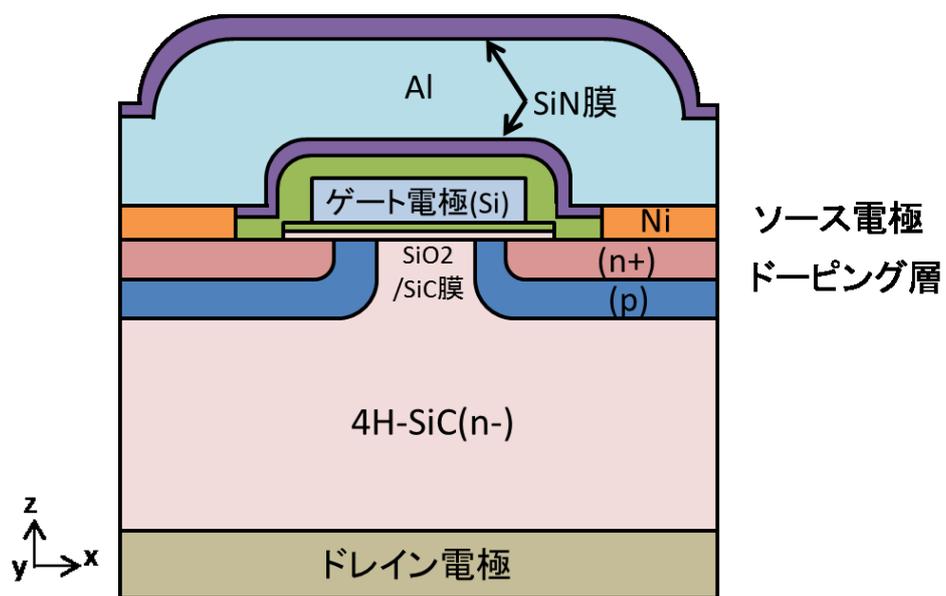


Fig 10. Diagram of SiC MOSFET.

2.4 ラマン分光測定

2.4.1 測定条件

ラマン分光測定は東レリサーチセンターによって行われた。Table 6 に分析条件を示す。測定断面はまず Fig 11 に示す断面加工位置でデバイスを切断し、切断面を機械研磨後、クロスセクションポリッシング法を用いて作製された。クロスセクションポリッシング法を用いることで断面に与えるひずみや応力の影響は少ないと考えられる。またラマン分光測定を行う上で、レーザー光の侵入深さを考える。侵入深さは以下の式によって得られる[11]。

$$\delta = \frac{1}{\alpha} \quad (2.2)$$

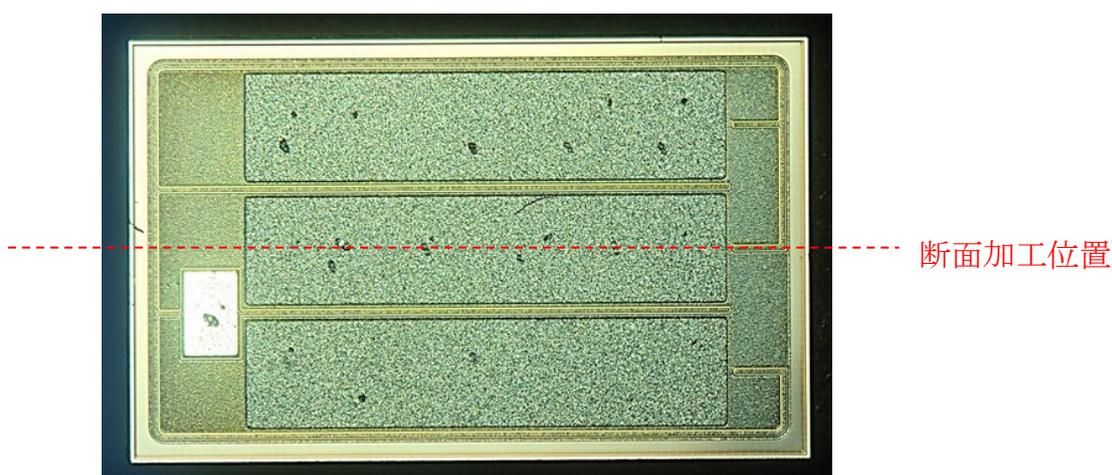
ここで α は吸収係数である。Fig 12 に Biedermanm による 4H-SiC の吸収係数を示す[12]。この図から 457.9nm のレーザー光を c 軸に垂直に照射した際の吸収係数は $50/\text{cm}^{-1}$ 程度であるため、侵入深さ $\delta = 200\mu\text{m}$ 程度となる。後方散乱配置のラマン分光測定を行う際に、光は表面から侵入し散乱した後表面から出てくるため、実際に観測される深さは $\frac{\delta}{2} = 100\mu\text{m}$ 程度の深さであると考えられる。Si は吸収係数が大きく、侵入深さは $1\mu\text{m}$ 以下であったのに対し[13]、SiC の侵入深さは大きいため測定に対する表面の影響が小さいと考えられる。

散乱配置は 180° 後方散乱配置であり散乱光の偏光は行っていないため、入射方向を Z とすると、 $Z(X, X+Y)\bar{Z}$ のように表記される。ここで、この X, Y, Z はレーザー光の入射方向を Z としたものであり、素子内の座標系とは異なることに注意が必要である。

測定位置は SiC MOSFET の SiC 基板部分のうちゲート絶縁膜およびソース電極付近とする。これはイオン注入等を行うゲート付近であり、電流密度が大きくなるためデバイスのスイッチングへの影響も大きく、また様々な材料の界面付近であるため実装応力が大きくなると考えられる部分であるためである。電極等の実装やイオン注入に起因する応力が影響するのはゲート絶縁体と基板の界面から数 μm として、垂直方向には $1\mu\text{m}$ 間隔で 16 点に対して測定を行った。ここで界面の直上部分を測定すると SiC 以外の材料のラマン散乱光をも測定してしまうため、界面から $0\mu\text{m}$ の部分の評価の代わりに $0.5\mu\text{m}$ 部分を測定する。また水平方向には、ビーム径の大きさを大幅に下回る間隔での計測は難しいため、 $0.5\mu\text{m}$ 間隔で 31 点に対して測定を行った。Fig 13 に測定断面の光学顕微鏡画像と測定位置を示す。

Table 6. Raman spectrometry condition.

分析装置	Ramanor U-1000
測定モード	顕微ラマン
散乱配置	Z(X, X + Y)Z̄ (レーザーの入射方向を Zとした場合)
対物レンズ	×90(NA = 0.9)
ビーム径	約 0.7 μm
光源	Ar+レーザー(457.9nm)
レーザーパワー	2mW (出力直後)
回折格子	Double 2400gr/mm
スリット	100 μm
検出器	CCD/Roper Scientific
温度	室温
水平方向間隔	0.5 μm
水平方向点数	31点
垂直方向間隔	1 μm
垂直方向点数	16点

**Fig 11. SiC device cutting position.**

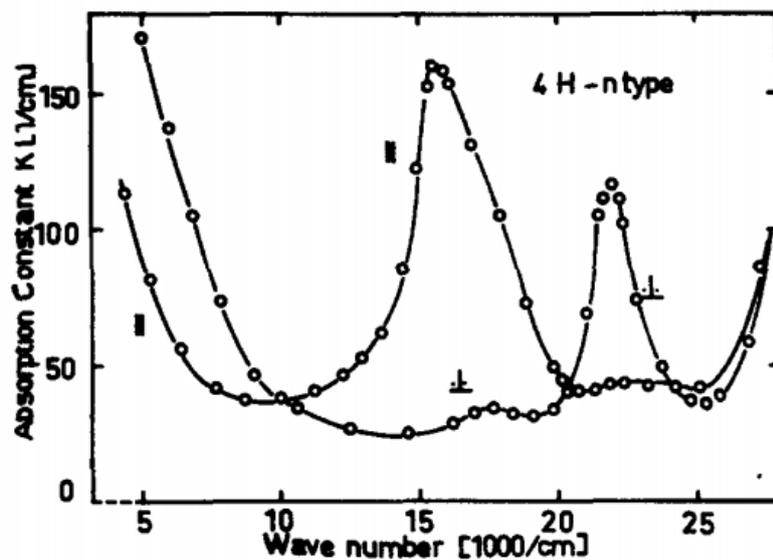


Fig 12. Absorption curves of n-type 4H-SiC crystals for polarization of light parallel-perpendicular to the c-axis of crystals[12].

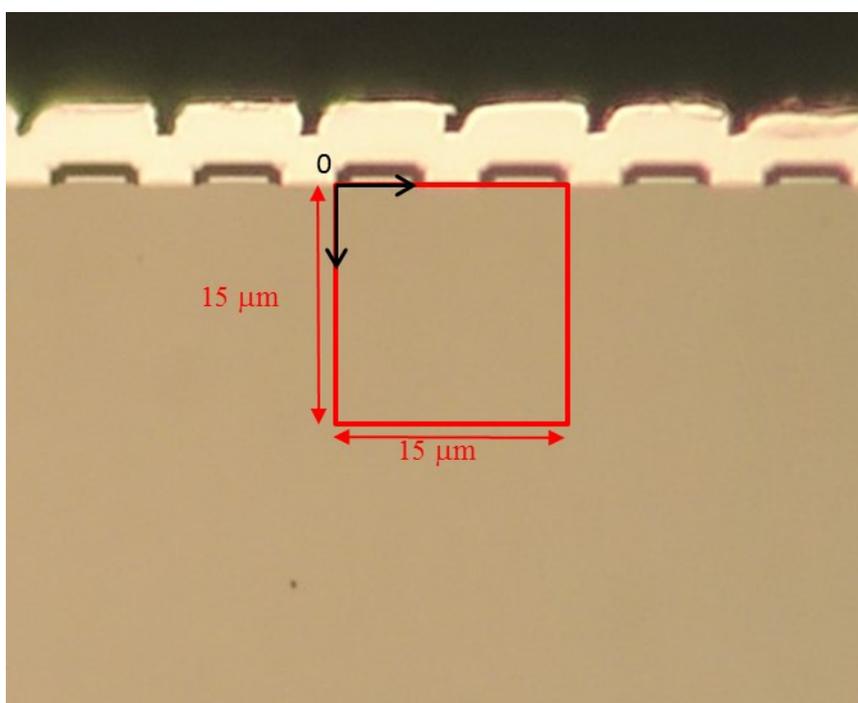


Fig 13. SiC MOSFET cross section and measurement area.

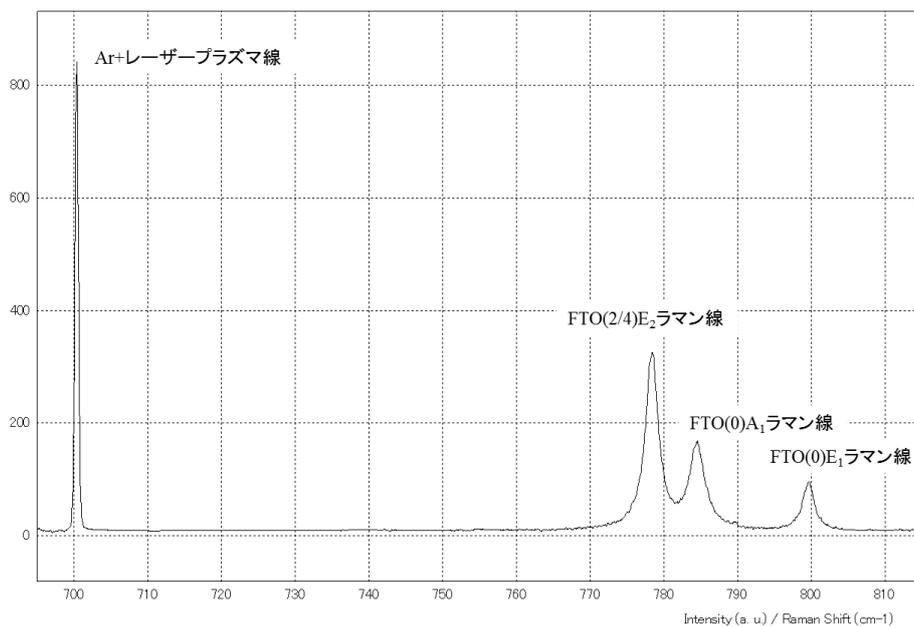
2.4.2 測定結果

Fig 14 に室温でのラマンスペクトルの例を, Fig 15 にフィッティング例を示す. 本研究の評価にはラマン分光測定で一般的に用いられる, 強度の強い 780cm^{-2} 付近の E2 モードと, A1 モードおよび E1 モードを用いるものとする.

Fig 16 に A1 モードの, Fig 17 に E1 モードの, Fig 18 に E2 モードの室温でのラマン分光測定によって得られたラマンスペクトルのシフト量分布を示す. これらの分布図において水平方向 $0\ \mu\text{m}$, $7.5\ \mu\text{m}$, $15\ \mu\text{m}$ 部がゲート直下部に, $3\ \mu\text{m}$ と $12\ \mu\text{m}$ 部がソース直下部に相当する.

ラマン線のシフトから応力は, ソース部直下に大きな圧縮応力, ゲート部直下に小さな圧縮応力, ゲート部直下とソース部直下の間の部分に微小な引張応力が生じていると考えられる. またゲート部直下とソース部直下の間の部分で半値幅が大きくなっている. これは同程度のドーピングを行っているはずのソース部直下より大きな半値幅となっている傾向が強いことからイオンドーピングの影響と異方応力の影響の両方によるものであると考えられる. 詳細な応力の評価は第3章で第一原理計算により応力とラマンシフトの関係式を求めたのち, 第4章にて行うものとする.

ラマン分光法による測定ではレーザー光のスポット径により平均化されて算出される. 故に局所的に非常に大きな応力がかかっている場合や, 圧縮応力と引張応力が近い部分にかかっている場合を計測することができないことに注意が必要である.



Toray Research Center Inc.

Fig 14. Measured raman spectrum.

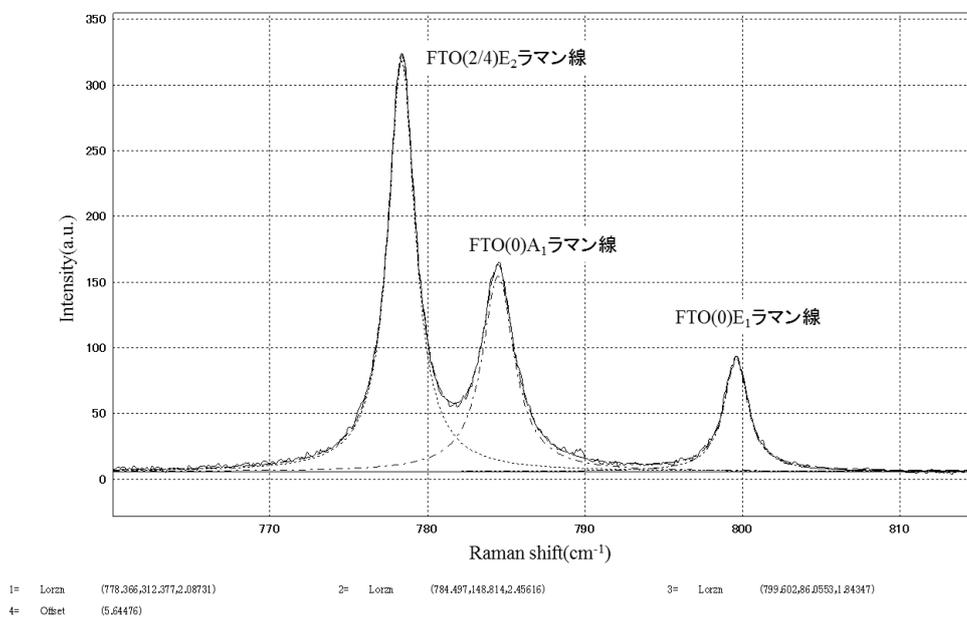


Fig 15. Example of fitting raman spectrum.

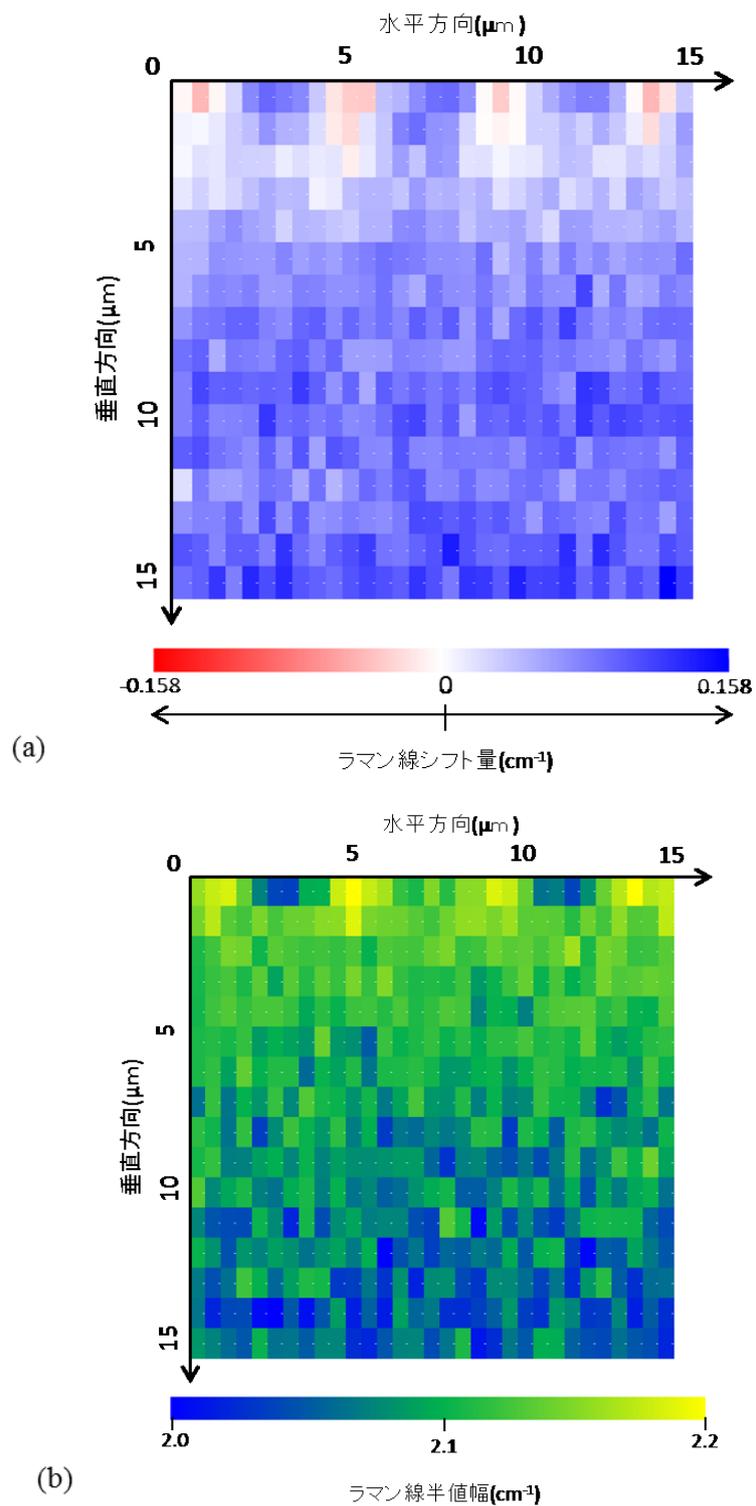


Fig 16. A1(0) mode (a)raman shift and (b)half width distribution.

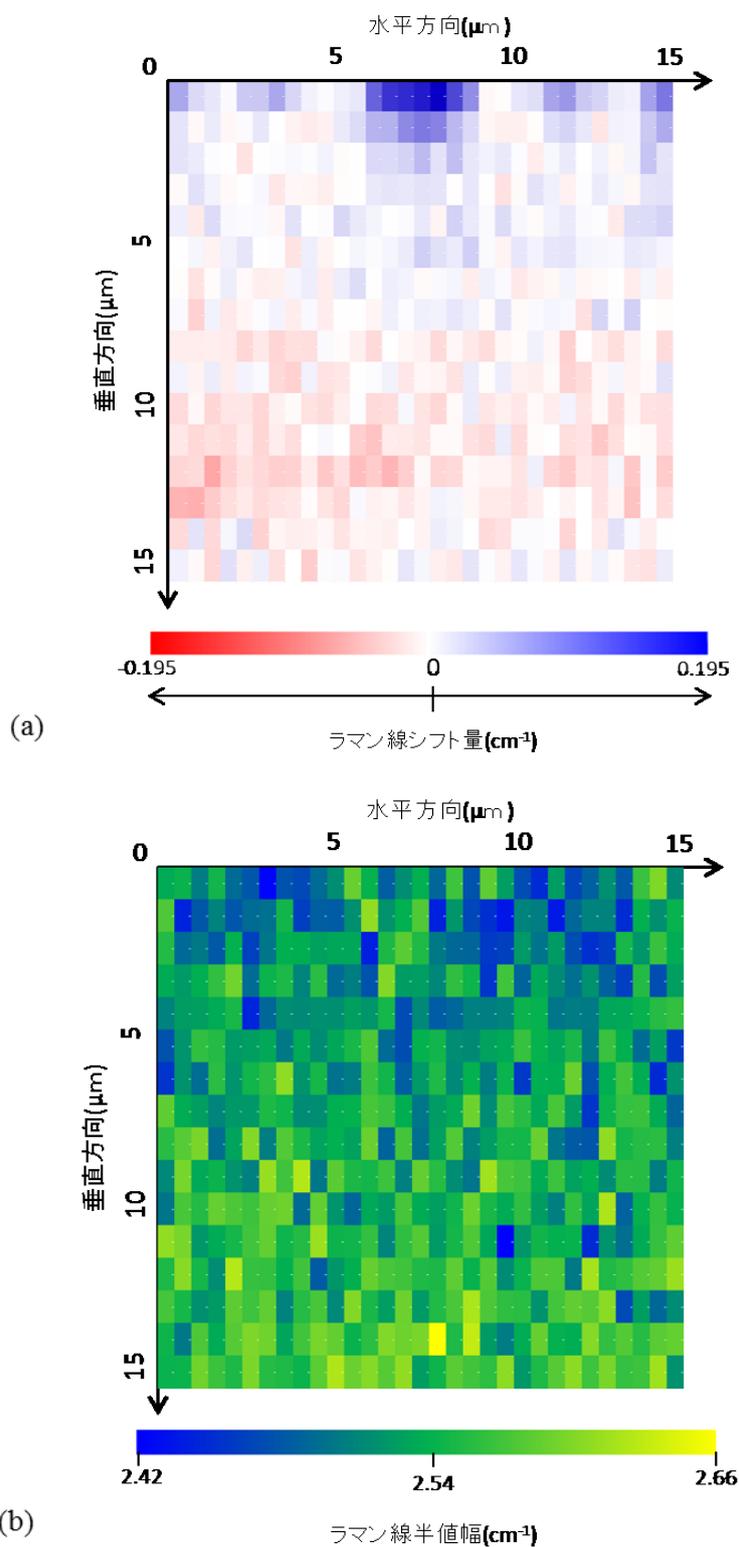


Fig 17. E1(0) mode (a)raman shift and (b)half width distribution.

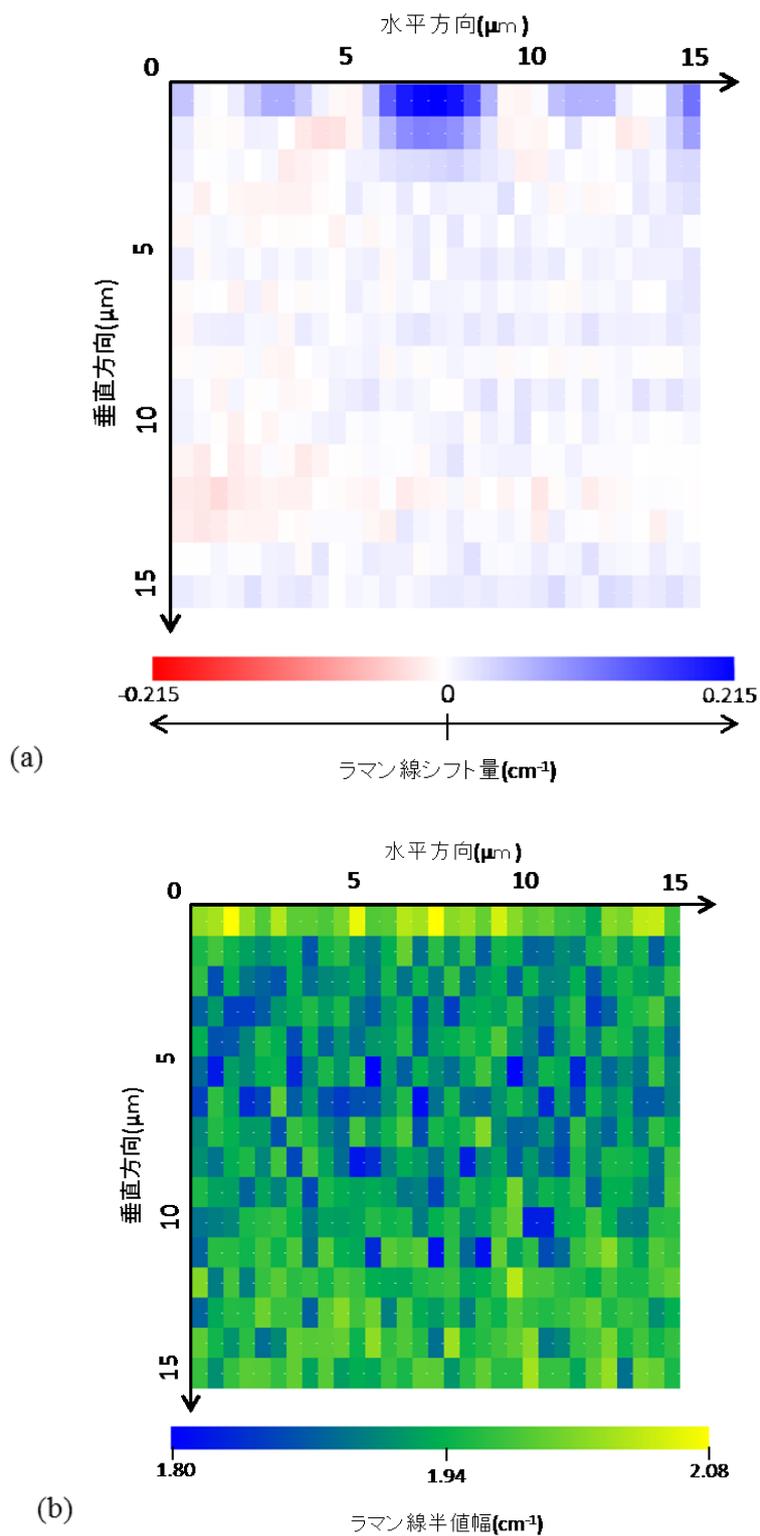


Fig 18. E2(2/4) mode (a)raman shift and (b)half width distribution.

第3章 第一原理計算による フォノン変形ポテンシャル係 数の算出

3.1 緒言

第2章においてラマン分光測定により、構造内のラマンシフト分布が得られた。しかし、有限要素法解析によって算出される応力とラマン分光測定によって計測されるラマンシフトは異なる値であり単純に比較することはできない。応力とラマンシフトの2つの値を比較するためにはフォノン変形ポテンシャル係数が必要である。この章では、第一原理計算を用いてフォノン変形ポテンシャル係数の算出を行う。まず、第一原理計算について説明する。次に、計算条件を示す。次に、第一原理計算によって得られたひずみとモード振動数を示す。最後に、計算の妥当性の評価と考察を行う。

3.1 第一原理計算

ラマン分光測定によって応力を評価するには、ラマンスペクトルのシフト量から応力へと変換するための係数が必要である。4H-SiC のラマン分光法を用いた応力測定は行われているものの、その変換係数は3C-SiC の値を用いるかシフト量による評価にとどまっている。故に、デバイスシミュレーションをする上で応力の実験値を求める必要がある本研究では、第一原理計算を用いて、結晶格子に対してひずみを与えてフォノンモードを算出することにより、応力とラマンシフトの変換係数を求める。第一原理計算ソフトとしては PHASE/0 を用いるものとする。

PHASE/0 は電子状態計算プログラムであり、密度汎関数法と第一原理擬ポテンシャル法に基づいて電子状態を計算することによって未知の物質の物性の計算が可能である。物性としては状態密度分布やバンド構造といった電子状態の他にも原子に働く力や

応力、格子定数、振動モードなど様々な物理量の算出が可能である。本研究ではフォノンの振動モードを求めるために PHASE/0 を用いる。

4H-SiC はユニットセルに Si 4 個、C 4 個の 8 個の原子を持つ。Fig 19 に 4H-SiC の積層構造の模式図を、Fig 20 にユニットセルのモデル図を示す。Fig 19 における赤い線で囲われた部分が Fig 20 のユニットセルにあたる。六方晶である 4H-SiC のユニットセルは対称性から六角形の 3 分の 1 にあたる平行六面体となる。本研究の第一原理計算でもユニットセルに対して計算を行う。Fig 20 における $(\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c})$ はユニットセルの基本ベクトルである。応力を入力として解析することは難しいため、解析パラメータとして $(\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c})$ を変更することによって、第一原理計算によって算出される結晶にかかる xyz の各軸方向の応力を操作し、応力によるフォノンモードの振動数の変化量を計算する。この解析ではラマン分光測定では計測されるスペクトルの強度は算出されない。

Table 7 にフォノンモードを求めるまでの第一原理計算の計算手順を示す。第一原理計算は基本的に実験値などとのフィッティングは必要としないが、第一原理計算で求められるバンドギャップは、実験で求められるバンドギャップと比較して低く算出される傾向があるため、電子誘電率の算出に際してバンドギャップに対してのみ補正を加えるものとする。バンドギャップと電子状態から算出した電子誘電率と、電子状態から算出される有効電荷から、オプティカルモードの縦波(TO)と横波(LO)が異なる振動数を持つ LO-TO 分裂現象を再現した計算が可能となり、振動解析と合わせることによってフォノンモードが求められる。

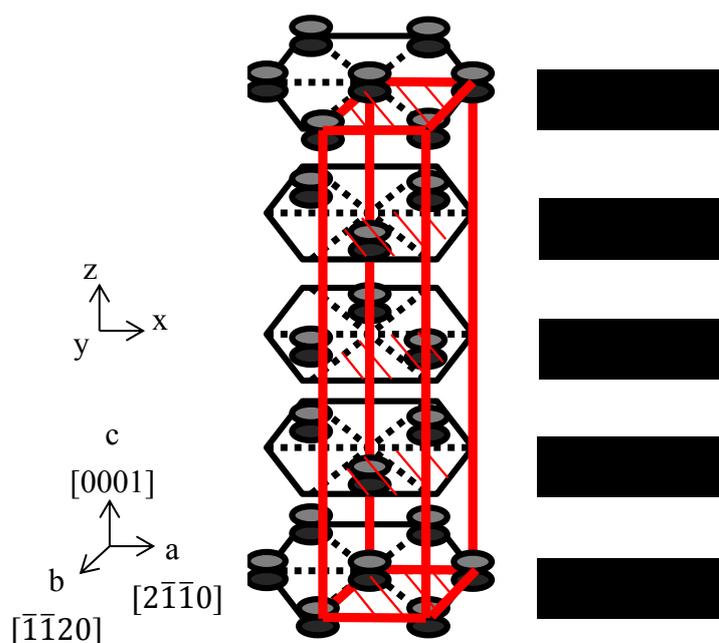


Fig 19. 4H-SiC layered structure.

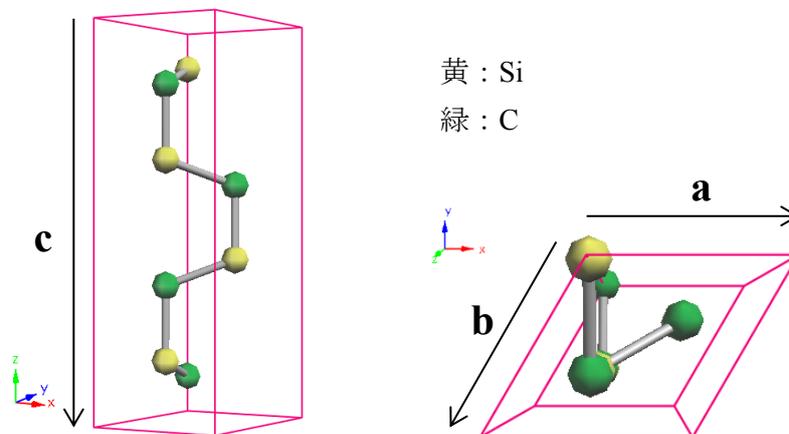
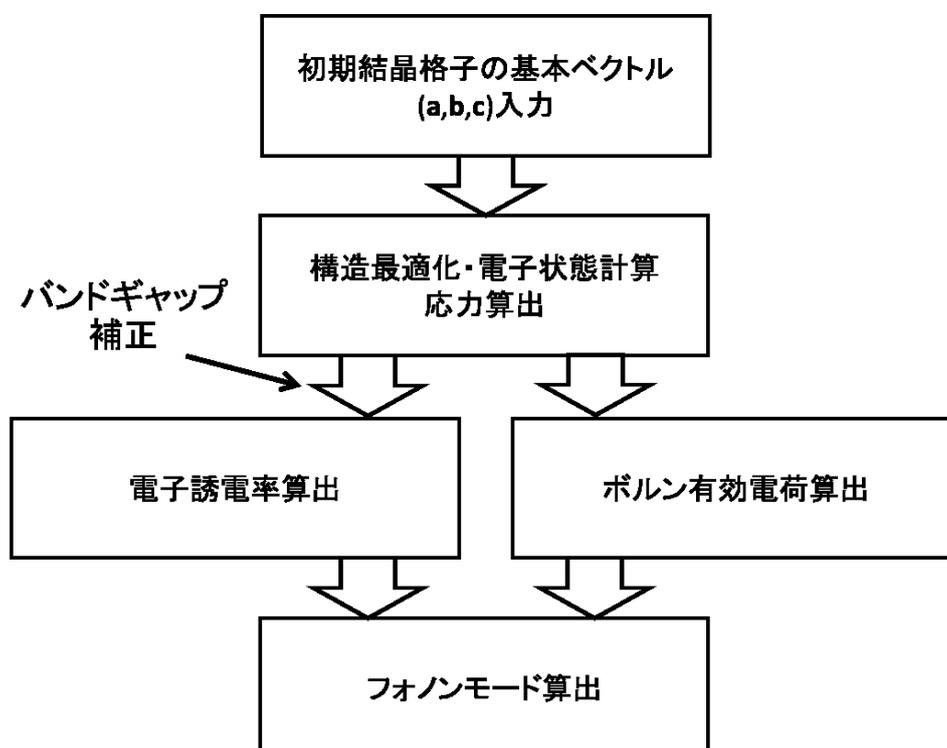


Fig 20. 4H-SiC unit cell.

Table 7. First-principles calculation procedure.



3.2 計算条件

前述のとおり本研究では第一原理計算ソフトとして PHASE/0 を用いる。Table 8 に計算条件を示す。計算手法としては PHASE/0 に導入されている LDA(Local Density Approximation)法を用いる。K 点のサンプリング法として Monkhorst-Pack 法[14]を用いるものとする。前節で述べたとおり、ユニットセルの基本ベクトルを変更することでユニットセルの応力を操作してラマンシフトを計算する。Table 9 に結晶格子にかける応力の条件を示す。ここで応力は引張応力を正の値とする。ここで、応力は基本ベクトルの入力後に構造緩和計算を行ってから算出されており、単位で目標の応力に設定することが難しいため、応力の目標値とずれる可能性がある。基準とする無ひずみ状態で算出される応力と、基本ベクトルを変更して算出される応力の差によって応力を評価するものとし、また解析において応力の意図した方向以外の成分の変化は $\pm 0.1\text{GPa}$ 以下となるように配慮した。約 10GPa , 5GPa , -5GPa , -10GPa の 4 つの応力に対して各条件で解析を行い、算出されるラマンシフトと応力の関係を直線でフィッティングすることで、ラマンシフトと応力の変換に必要な係数を求める。また一軸応力だけでなく三軸応力や二軸等方応力、二軸異方応力についても計算を行うことで、他の応力条件に対しても同様に求められるかを確認する。

Table 8. Condition of first-principles calculation.

計算手法	密度汎関数法・LDA 法
波動関数のカットオフエネルギー	36.0 Hartree
電荷密度のカットオフエネルギー	324.0 Hartree
ユニットセルあたりの原子数	8 (Si:4, C:4)
計算バンド数	20
K 点分割数	$12 \times 12 \times 4$
K 点サンプリング法	Monkhorst-Pack 法[14]
バンドギャップ基準値	3.26eV [1]

Table 9. Stress condition of calculation.

応力条件	方向	応力値(GPa)
一軸応力	X	約-10, -5, 5, 10
	Y	
	Z	
三軸応力	x, y, z	
二軸等方応力	x, y	
	x, z	
	y, z	
二軸異方応力	x, -y	
	x, -z	
	y, -z	
せん断応力	xy	
	xz	
	yz	
	xz,yz	

3.3 解析結果

3.3.1 無応力状態

Table 10 に基準となる無応力状態でのフォノンモード解析結果を示す．モードと波数ベクトルは振動のベクトルからアサインした．この表には B1 モードのようなラマン不活性なモードでありラマン分光法によって計測できないモードも含む．ラマン分光測定により計測されたモードは Fig 14 から 780 cm^{-1} 付近の E2(2/4)ラマン線と A1(0)ラマン線、 800 cm^{-1} 付近の E1(0)ラマン線である．したがって、本研究における第一原理計算によるラマンシフト-応力変換係数の評価に用いるスペクトルは Table 10 における太字の、E2(2/4)モードの 772.84 cm^{-1} , 776.84 cm^{-1} , 781.21 cm^{-1} , 784.84 cm^{-1} の 4 つのモード、A1(0)モードの 794.91 cm^{-1} のモード、E1(0)モードの 794.84 cm^{-1} , 796.36 cm^{-1} の 2 つのモードのものとする．以下これらのモードを便宜的に、E2 モードの 772.84 cm^{-1} のモードを E2-1、E1 モードの 791.84 cm^{-1} のモードを E1-2 のように表すものとする．Table 10 の振動数を Table 4 のラマン分光測定による振動数と比較すると、最も誤差の大きい E1(4/4)モードで 3% 程度の誤差、評価に用いるモードでは誤差 2% 以下の精度で計算されている．計算結果を (2.1) に当てはめ、せん断成分を無視して以下の式に基づいて a_i, b_i, c_i ($i = A1, E1, E2$) を求めるものとする．

$$\begin{aligned}
 \Delta\omega_{A1-1} &= a_{A1}(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) + b_{A1}\sigma_{zz}, \\
 \Delta\omega_{E1-1} &= a_{E1-1}(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) + b_{E1-1}\sigma_{zz} \\
 &\quad + c_{E1-1}(\sigma_{xx} - \sigma_{yy}), \\
 \Delta\omega_{E1-2} &= a_{E1-2}(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) + b_{E1-2}\sigma_{zz} \\
 &\quad - c_{E1-2}(\sigma_{xx} - \sigma_{yy}), \\
 \frac{\Delta\omega_{E2-1} + \Delta\omega_{E2-3}}{2} &= a_{E2-1}(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) + b_{E2-1}\sigma_{zz} \\
 &\quad + c_{E2}(\sigma_{xx} - \sigma_{yy}), \\
 \frac{\Delta\omega_{E2-2} + \Delta\omega_{E2-4}}{2} &= a_{E2-2}(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) + b_{E2-2}\sigma_{zz} \\
 &\quad - c_{E2-2}(\sigma_{xx} - \sigma_{yy}),
 \end{aligned} \tag{3.1}$$

応力からラマンシフト算出の際には、せん断応力を 0 とみなして計算することが多い．以下においても明示しない限りせん断応力は 0 の条件のもと計算を行う．

Table 10. Analysis results of 4H-SiC phonon mode.

モード	A1	B1	E1	E2
振動数(cm ⁻¹)	612.87 (4/4)	403.67 (2/4)	259.48 (4/4)	191.90 (2/4)
	794.91 (0)	411.42 (2/4)	260.29 (4/4)	192.72 (2/4)
かっこの中は Fig 4 の	849.44 (4/4)	924.29 (2/4)	765.09 (4/4)	199.64 (2/4)
波数ベクトル x		932.82 (2/4)	768.45 (4/4)	200.93 (2/4)
			791.84 (0)	772.84 (2/4)
			796.36 (0)	776.84 (2/4)
				781.21 (2/4)
				784.84 (2/4)

3.3.2 一軸応力

一軸応力での結果を示す。

Fig 21 に x 軸方向の、Fig 22 に y 軸方向の、Fig 23 に z 軸方向の応力とラマンシフトの関係および線形近似を示す。それぞれの図において(a)A1 モード、(b)E1 モード、(c)E2 モードを示す。これらの線形近似を(3.1)式に当てはめて変換係数を求める。以下に算出された変換係数を用いた関係式を示す。

$$\begin{aligned}
 \Delta\omega_{A1} &= 0.03(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) - 3.85\sigma_{zz}, \\
 \Delta\omega_{E1} &= -1.95(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) + 0.05\sigma_{zz} \\
 &\quad \pm 1.61(\sigma_{xx} - \sigma_{yy}), \\
 \Delta\omega_{E2} &= -1.99(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) - 0.147\sigma_{zz} \\
 &\quad \pm 1.66(\sigma_{xx} - \sigma_{yy}),
 \end{aligned} \tag{3.2}$$

A1 モードの x 軸、y 軸応力に起因する振動数の変化に線形性が乏しかったため、後述の二軸等方応力条件での計算から a_{A1} の値は 0.02 とした。ここで求めた変換係数について次節以降で検証を行う。

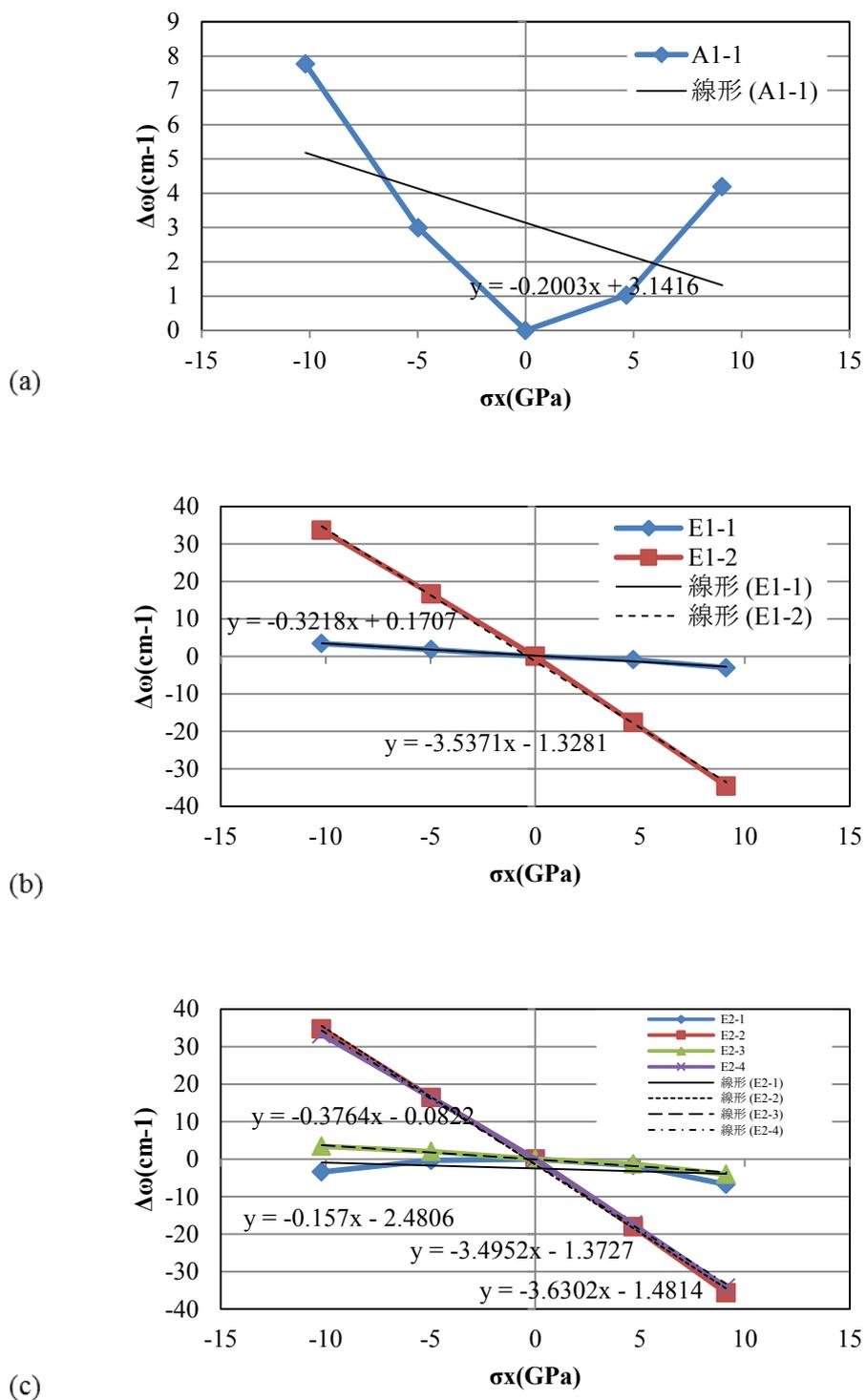


Fig 21. Calculated raman shift and linear approximation under uniaxial stress σ_x .
 (a)A1 mode (b)E1 mode (c)E2 mode

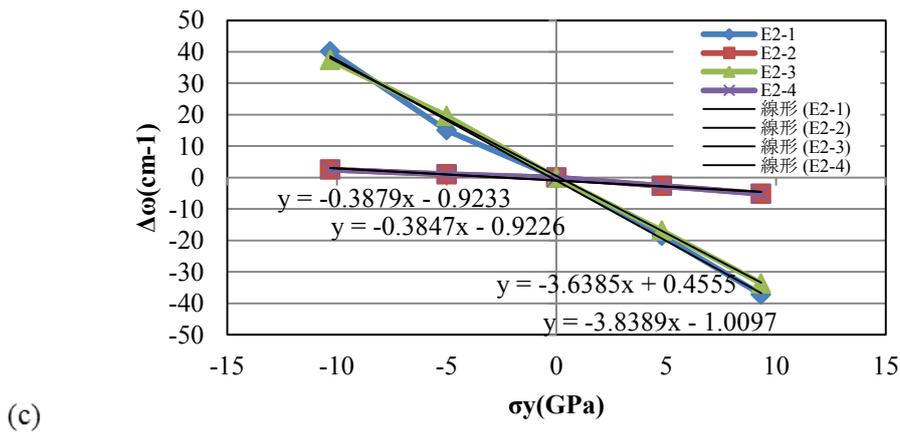
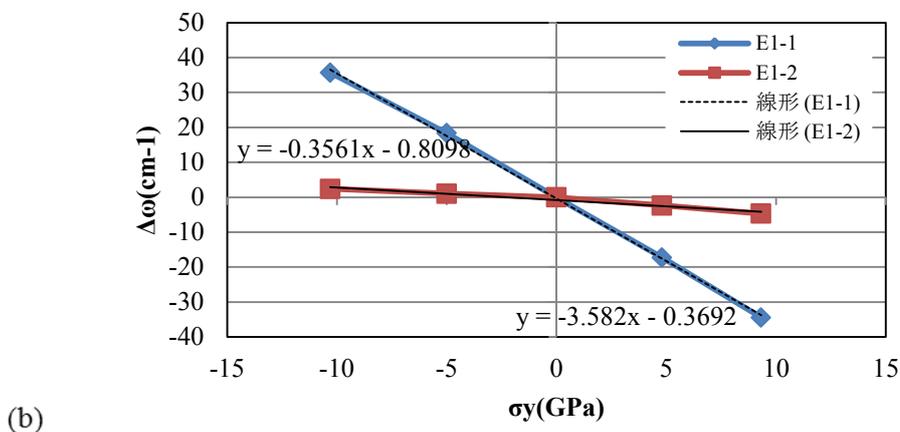
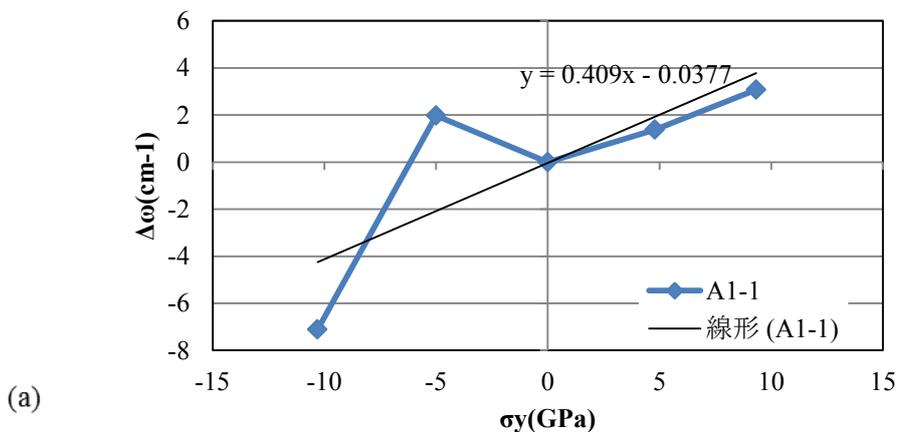


Fig 22. Calculated raman shift and linear approximation under uniaxial stress σ_y .
 (a)A1 mode (b)E1 mode (c)E2 mode

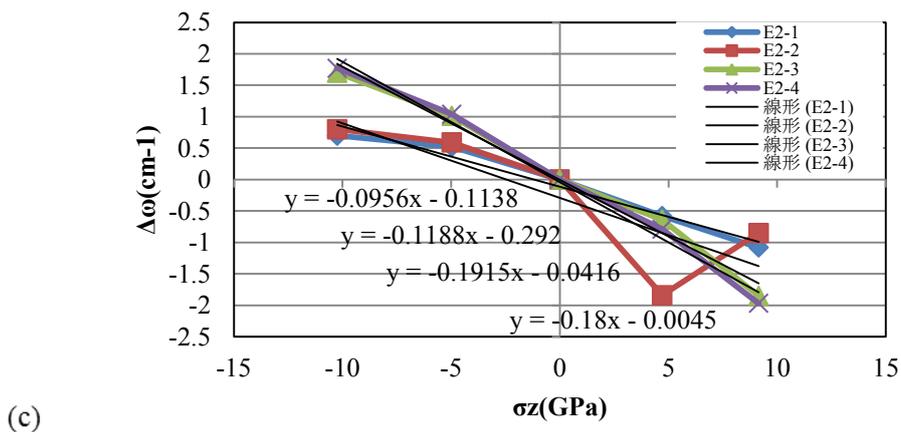
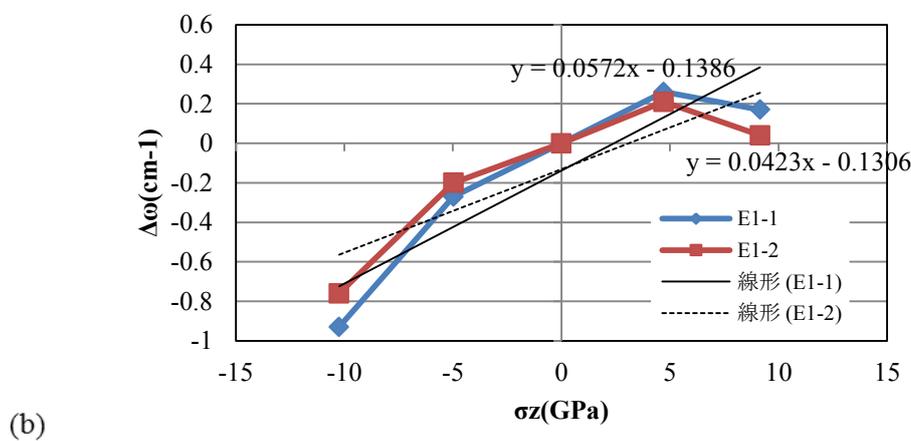
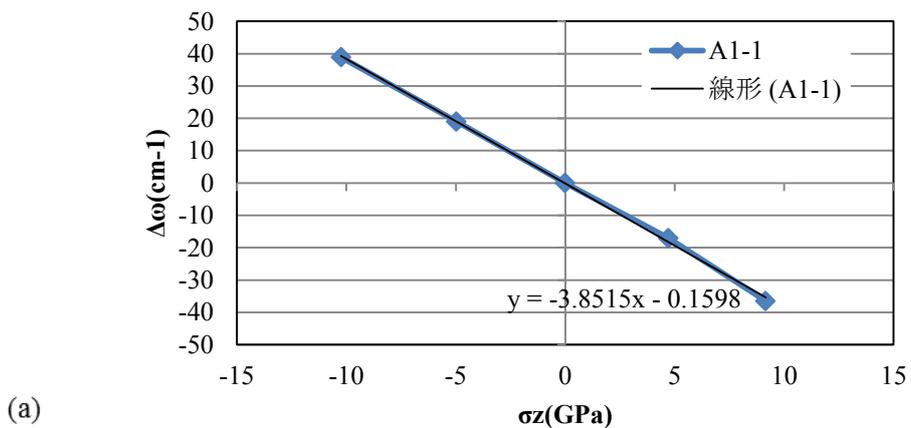
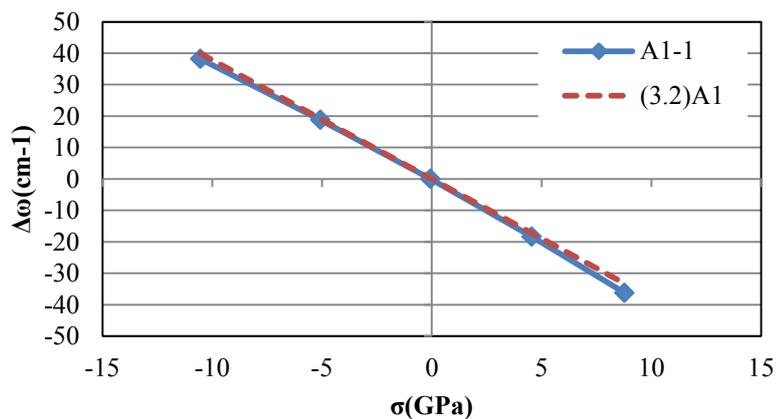


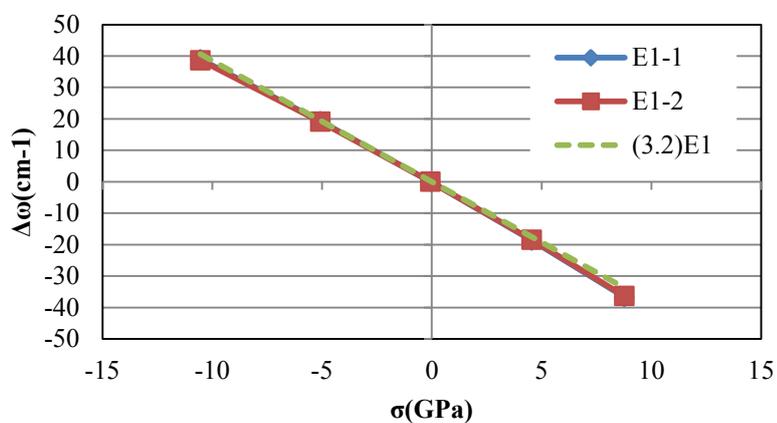
Fig 23. Calculated raman shift and linear approximation under uniaxial stress σ_z .
 (a)A1 mode (b)E1 mode (c)E2 mode

3.3.3 三軸等方応力

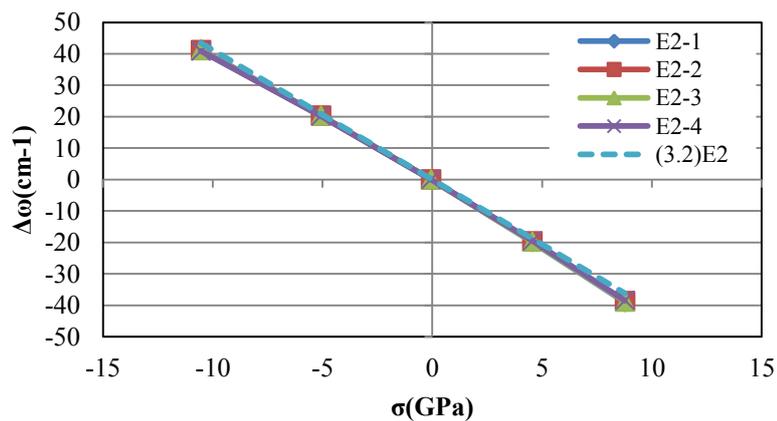
Fig 24 に x,y,z の三軸に対して等方応力をかけた場合の(a)A1 モード, (b)E1 モード, (c)E2 モードのシフト変化量と応力の関係と(3.2)で求めた関係を示す. よい一致を示しているが, どのモードに関しても $\pm 10\text{GPa}$ の非常に大きな応力がかかる部分において多少の誤差が見られる. しかしその誤差は 10%程度であり, 実際にデバイス上でかかる $<1\text{GPa}$ 程度の応力に対しては数%程度の精度で一致しており, 評価が可能であると考えられる.



(a)



(b)



(c)

Fig 24. Calculated raman shift and (3.2) model under triaxial stress.

(a)A1 mode (b)E1 mode (c)E2 mode

3.3.4 二軸等方応力

二軸に対して等方の応力をかけた際の応力とラマンシフトの関係を計算した。Fig 25 に x 軸と y 軸方向，Fig 26 に x 軸と z 軸方向，Fig 27 に y 軸と z 軸方向に応力をかけた際のラマンシフト変化量と応力の関係と(3.2)式を示す。それぞれの図において(a)A1 モード，(b)E1 モード，(c)E2 モードを示す。(3.2)式の a_{A1} は x 軸と y 軸に等方応力をかけた際のラマンシフト変化量を線形近似して算出した。これらも三軸等方応力と同様，大きな応力において誤差が発生するが，小さな応力においてはいい一致を見せており，二軸等方応力や三軸等方応力においては(3.2)式によって応力とラマンシフトの関係が表されているといえる。

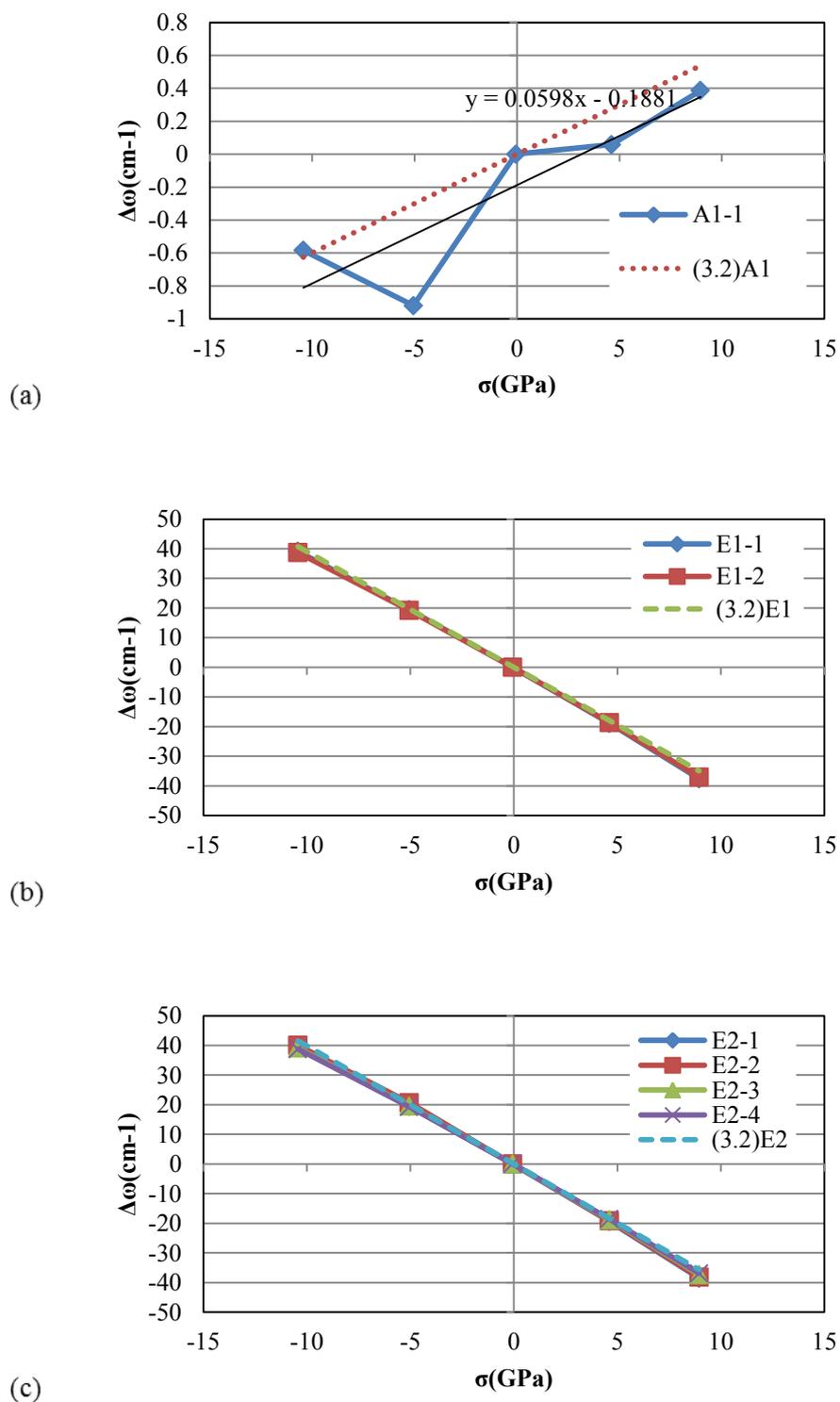


Fig 25. Calculated raman shift and (3.2) model under biaxial isotropic stress σ_x, σ_y .
 (a)A1 mode (b)E1 mode (c)E2 mode

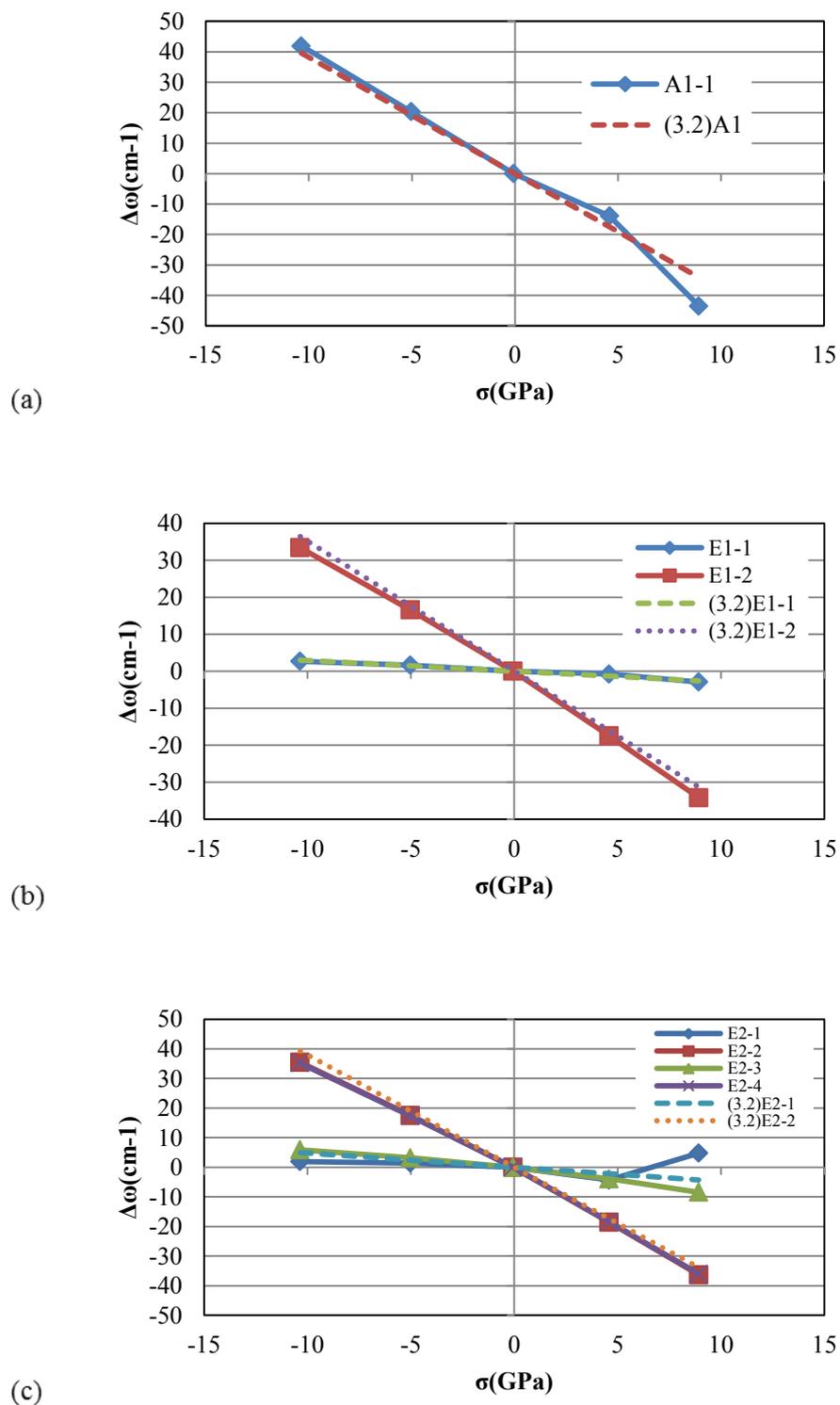


Fig 26. Calculated raman shift and (3.2) model under biaxial isotropic stress σ_x, σ_z .
 (a)A1 mode (b)E1 mode (c)E2 mode

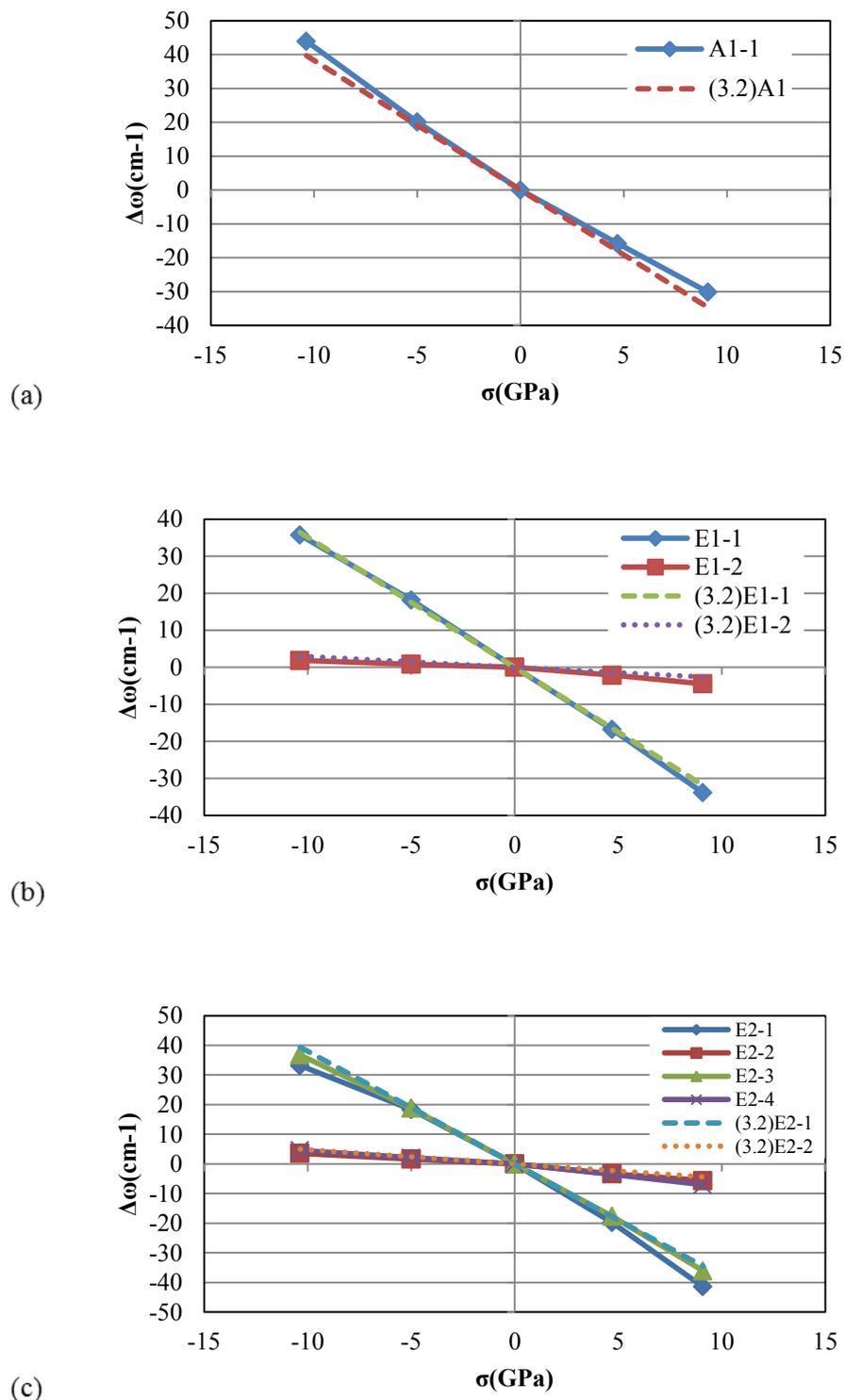


Fig 27. Calculated raman shift and (3.2) model under biaxial isotropic stress σ_y, σ_z .
 (a)A1 mode (b)E1 mode (c)E2 mode

3.3.5 二軸異方応力

以上では一軸応力または等方応力に対してラマンシフトを算出してきたが、本項では異方応力の条件での計算結果と(3.2)式の比較を行う。Fig 28 に x 軸方向と y 軸方向に異方応力をかけた際の、Fig 29 に x 軸方向と z 軸方向に異方応力をかけた際の、Fig 30 に y 軸方向と z 軸方向に異方応力をかけた際のラマンシフト変化量と応力の関係と(3.2)式を示す。それぞれの図において(a)A1 モード、(b)E1 モード、(c)E2 モードを示す。一軸応力や等方応力では計算結果と(3.2)式が数%の誤差でよく一致していたが、異方応力に対しては Fig 28(a)のように大きくずれる結果も見られた。これは異方応力によるひずみは同じ応力でも等方応力や一軸応力の条件よりも結晶の対称性が大きく崩れるためであると考えられる。しかし傾向としては一致しており、またより小さい 1GPa 程度の応力を考えると(3.2)式によって異方応力に対しても評価できるのではないかと考えられる。

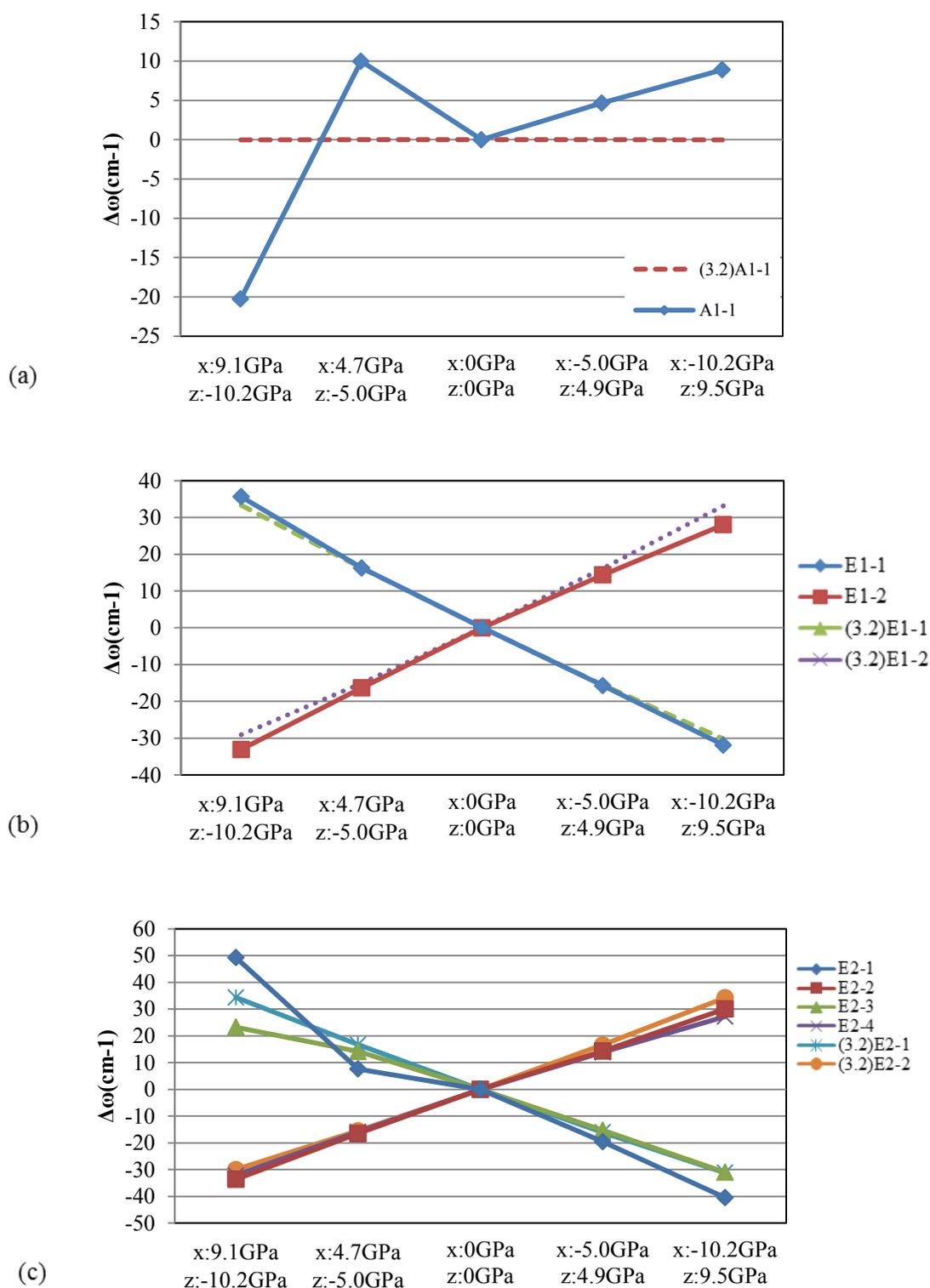


Fig 28. Calculated raman shift and (3.2) model under biaxial anisotropic stress σ_x, σ_y .
 (a)A1 mode (b)E1 mode (c)E2 mode

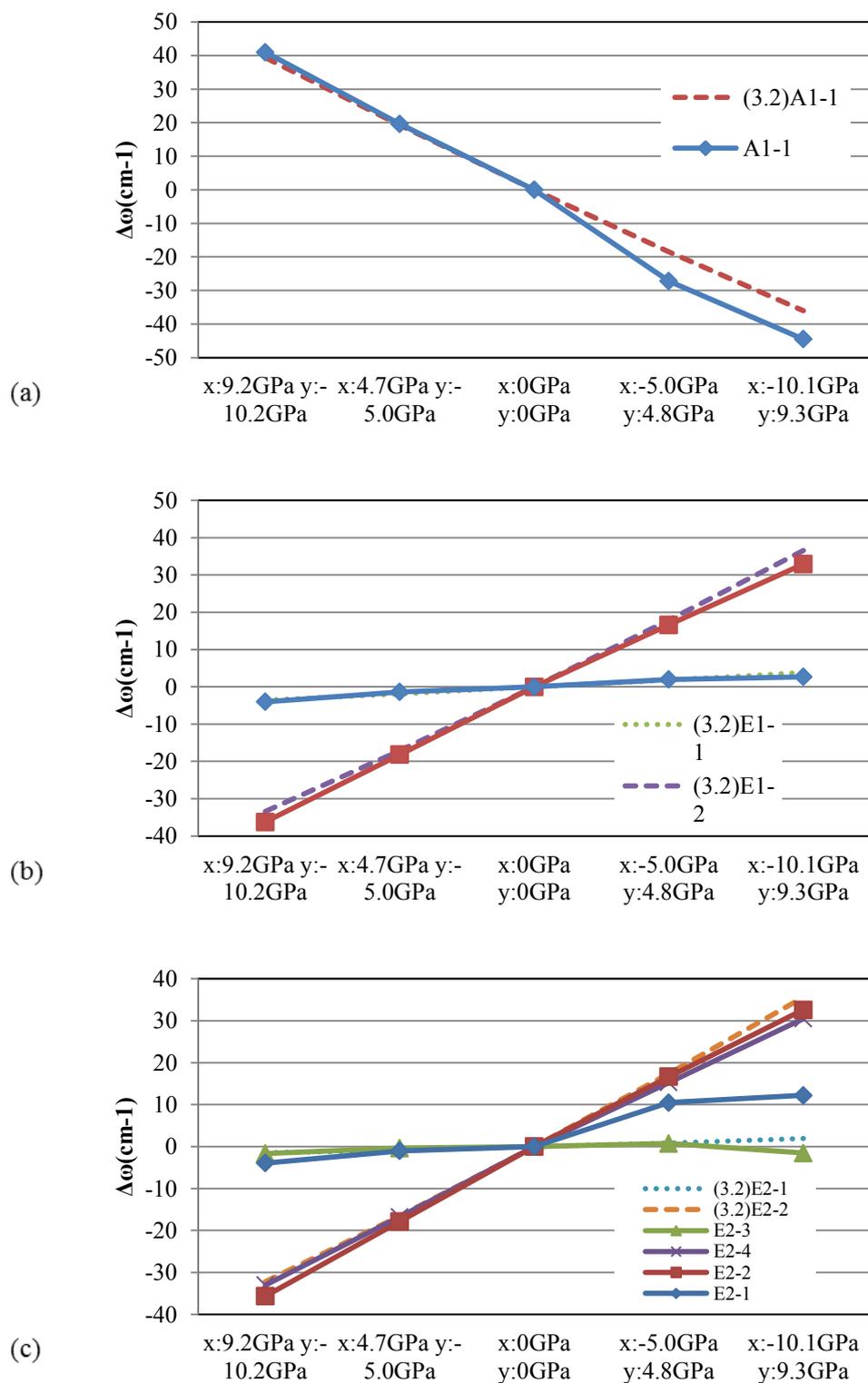


Fig 29. Calculated raman shift and (3.2) model under biaxial anisotropic stress σ_x, σ_z .
 (a)A1 mode (b)E1 mode (c)E2 mode

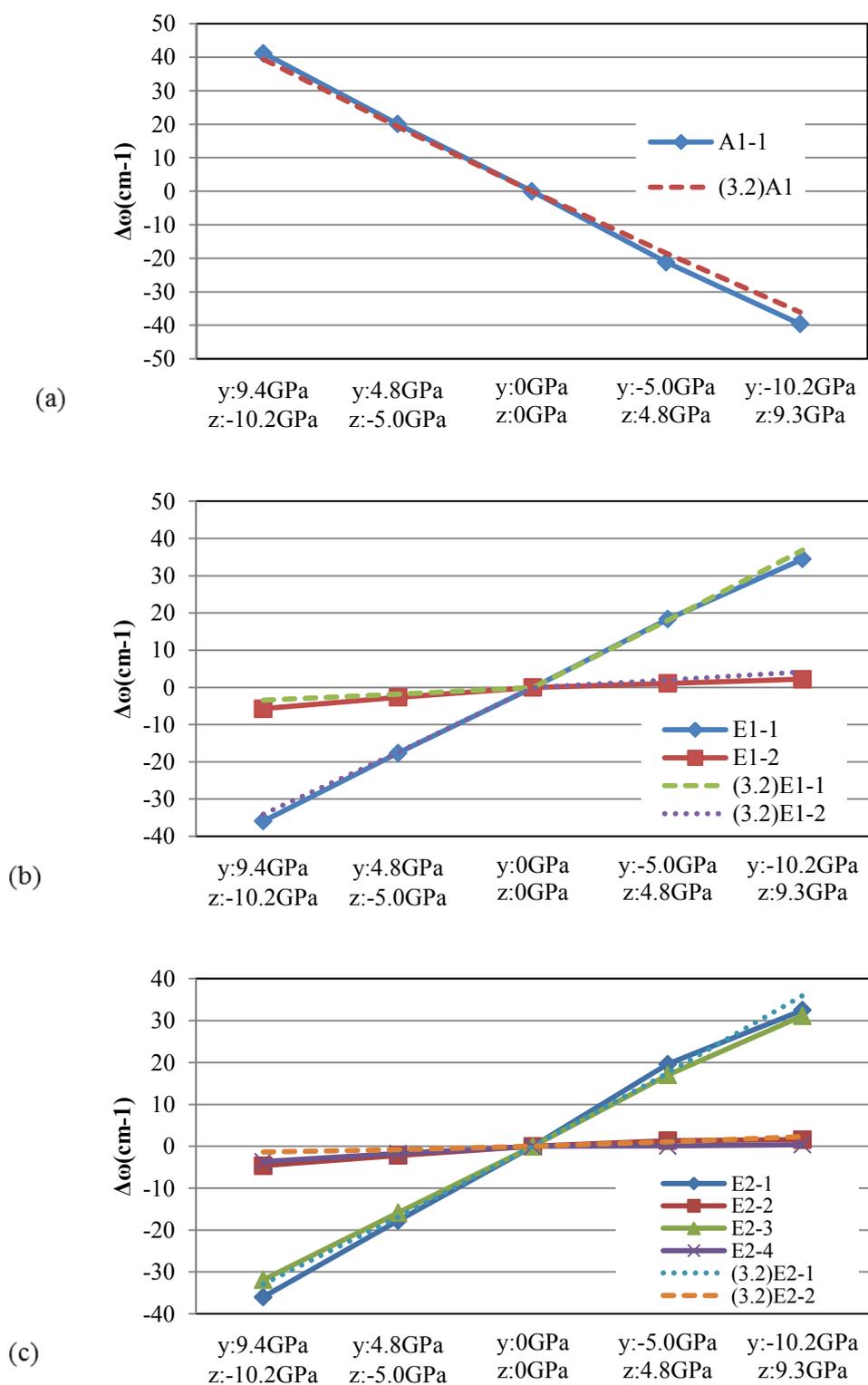


Fig 30. Calculated raman shift and (3.2) model under biaxial anisotropic stress σ_y, σ_z .
 (a)A1 mode (b)E1 mode (c)E2 mode

3.3.6 せん断応力

ここまでは(3.1)式および(3.2)式に基づいてせん断応力が0の条件で計算した。しかし実際のデバイスにはせん断応力も発生しうる。本項では Briggs らによるウルツ鉱型結晶のせん断応力 τ を考慮した、以下のフォノンの振動数変化の式を検討する[8]。

$$\begin{aligned} \Delta\omega_{E1} &= a_{E1}(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) + b_{E1}\sigma_{zz} \\ &\quad \pm c_{E1}[(\sigma_{xx} - \sigma_{yy})^2 + 4\tau_{xy}^2]^{1/2}, \\ \Delta\omega_{E2} &= a_{E2}(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) + b_{E2}\sigma_{zz} \\ &\quad \pm c_{E2}[(\sigma_{xx} - \sigma_{yy})^2 + 4\tau_{xy}^2]^{1/2}, \end{aligned} \quad (3.3)$$

以下においてせん断応力 τ_{xy} の係数 c_i が前項までで求めた(3.2)式の値で妥当かどうかの評価と、せん断応力 τ_{xz} , τ_{yz} の影響の考察を行う。

せん断応力 τ_{xy}

Fig 31 にせん断応力 τ_{xy} による格子の変形の模式図を、Fig 32 に xy 平面にせん断応力をかけた際のラマンシフト変化量と応力の関係の計算結果と(3.3)式を示す。図において (a)A1 モード、(b)E1 モード、(c)E2 モードを示す。A1 モードの振動数がモデル式よりも高く計算されており、傾向が大きく異なっている。これは A1 モードとしている振動モードの振動方向が c 軸に完全に平行な方向の振動ではなく、比較的大きい c 軸に垂直な方向の成分を持っている事が原因として考えられる。同様に c 軸に垂直な方向の振動であるはずの E2-2 モードの振動ベクトルは c 軸に垂直な方向の振動成分のみでなく、比較的大きい c 軸に平行な振動の成分を持っており、このモードの振動数はモデル式によって表される値と比べて低い振動数で算出されている。このため A1 モードの振動数は高い振動数として、E2-2 は低い振動数として算出されていると考えられる。E1 モードおよび E2 モードの応力による振動数の変化は(3.3)式と同様の変化傾向であるが、特に振動数が増加するモードについて誤差が非常に大きい。そのため今後の実験による妥当性評価が重要であり、せん断応力の評価をラマンシフトによって行う際には注意が必要であるといえる。

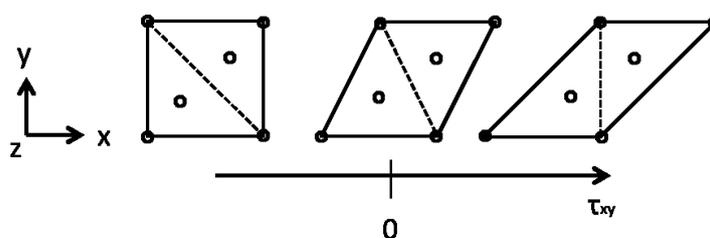


Fig 31. Unit cell deformation caused by shear stress τ_{xy}

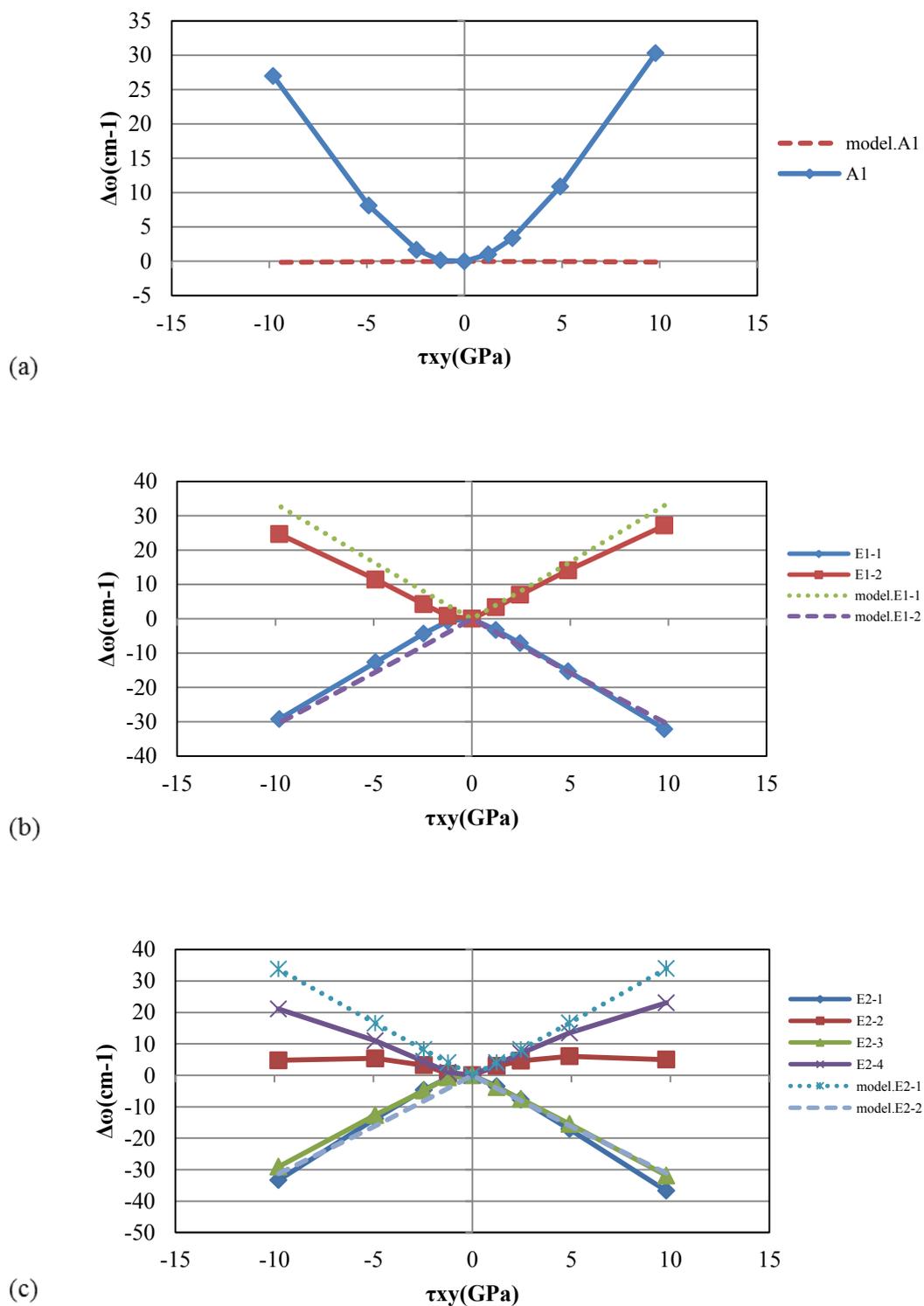


Fig 32. Calculated raman shift and (3.3) model under shear stress τ_{xy} .
 (a)A1 mode (b)E1 mode (c)E2 mode

せん断応力 τ_{xz} , τ_{yz}

Fig 33 に xz 平面にせん断応力をかけた際のラマンシフト変化量と応力の関係の計算結果を, Fig 34 に yz 平面にせん断応力をかけた際のラマンシフト変化量と応力の関係の計算結果を, Fig 35 に xz 平面と yz 平面に等しくせん断応力をかけた際のラマンシフト変化量と応力の関係の計算結果を示す. せん断応力 τ_{xz} と τ_{yz} のラマンシフトへの差はほとんど無く, これらのせん断応力の大きさに比例してシフト量は増大している. また $\tau_{xz} = \tau_{yz}$ のもとせん断応力をかけた解析から, 各振動数は τ_{xz} と τ_{yz} の二乗和平方根に比例することが考えられる. そして(3.3)式では A1 モードは τ_{xz} と τ_{yz} の項を持っていないため, せん断応力によって変動しないものとなっているが, この計算結果では明らかに応力に比例してシフトが見られる. せん断応力のみであれば評価可能であるが, 垂直応力が含まれる場合は評価が難しいため, せん断応力の考慮のためにはより適切なモデルの構築が必要であると言える.

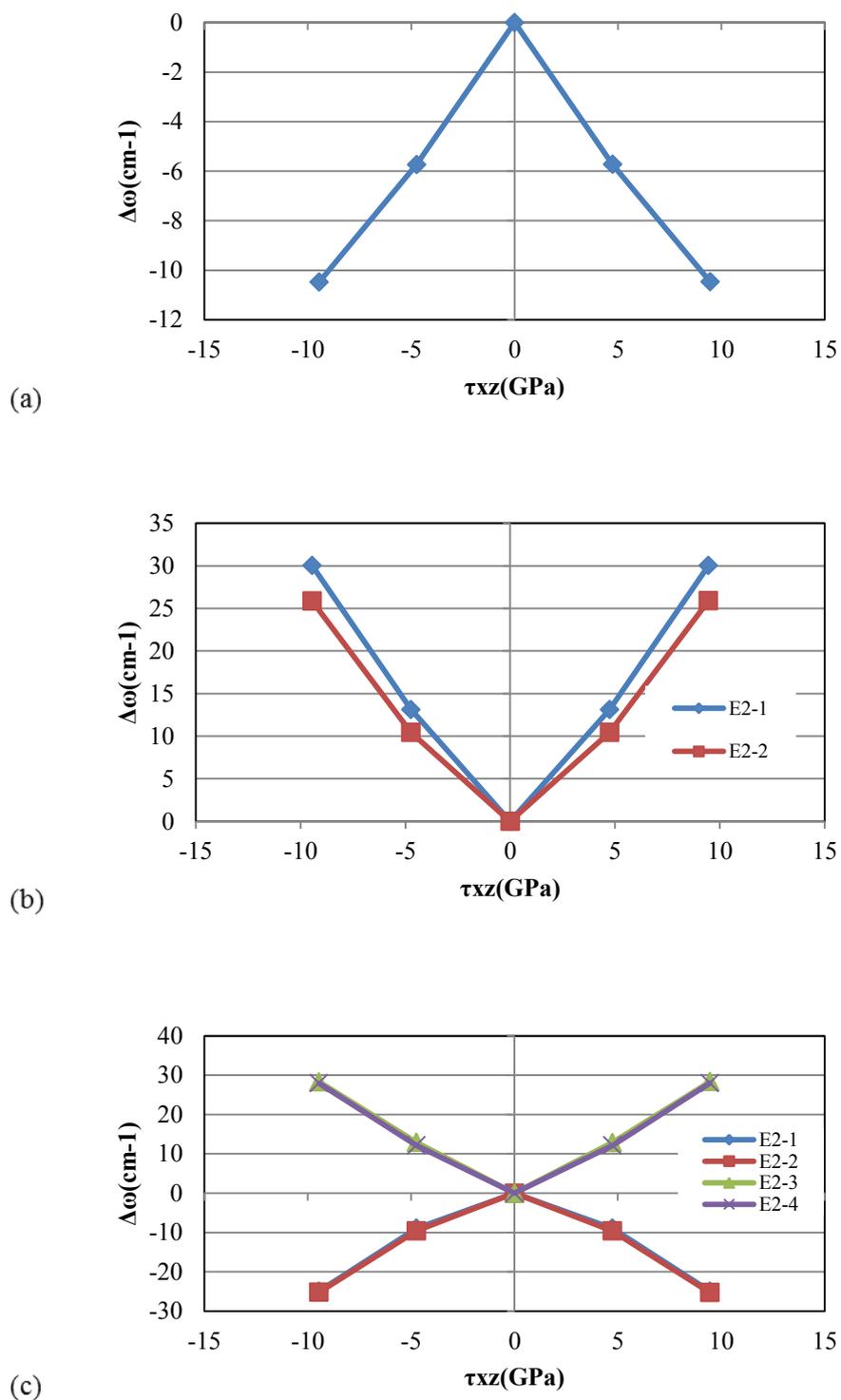


Fig 33. Calculated raman shift under shear stress τ_{xz} .
 (a)A1 mode (b)E1 mode (c)E2 mode

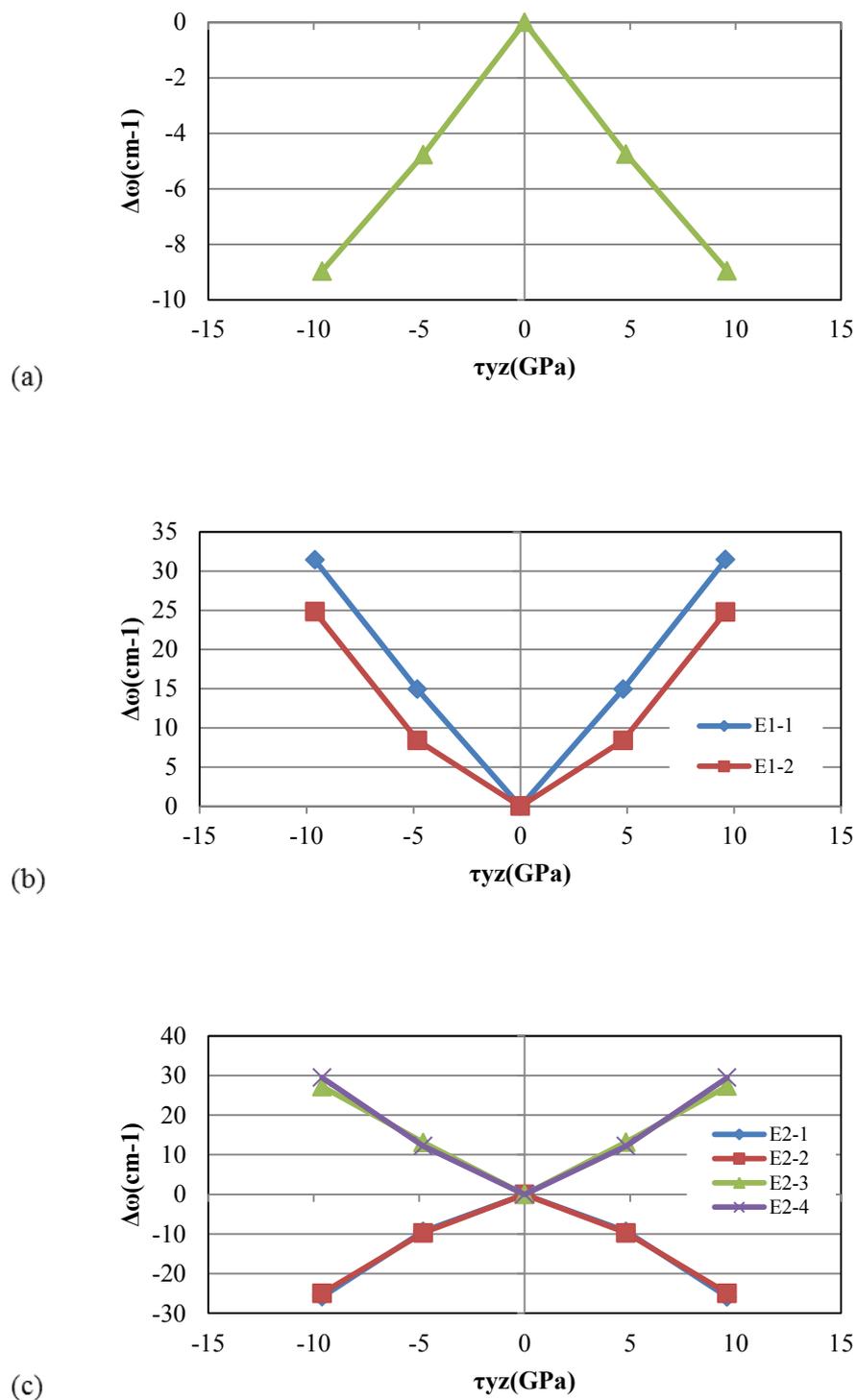


Fig 34. Calculated raman shift under shear stress τ_{yz} .
 (a)A1 mode (b)E1 mode (c)E2 mode

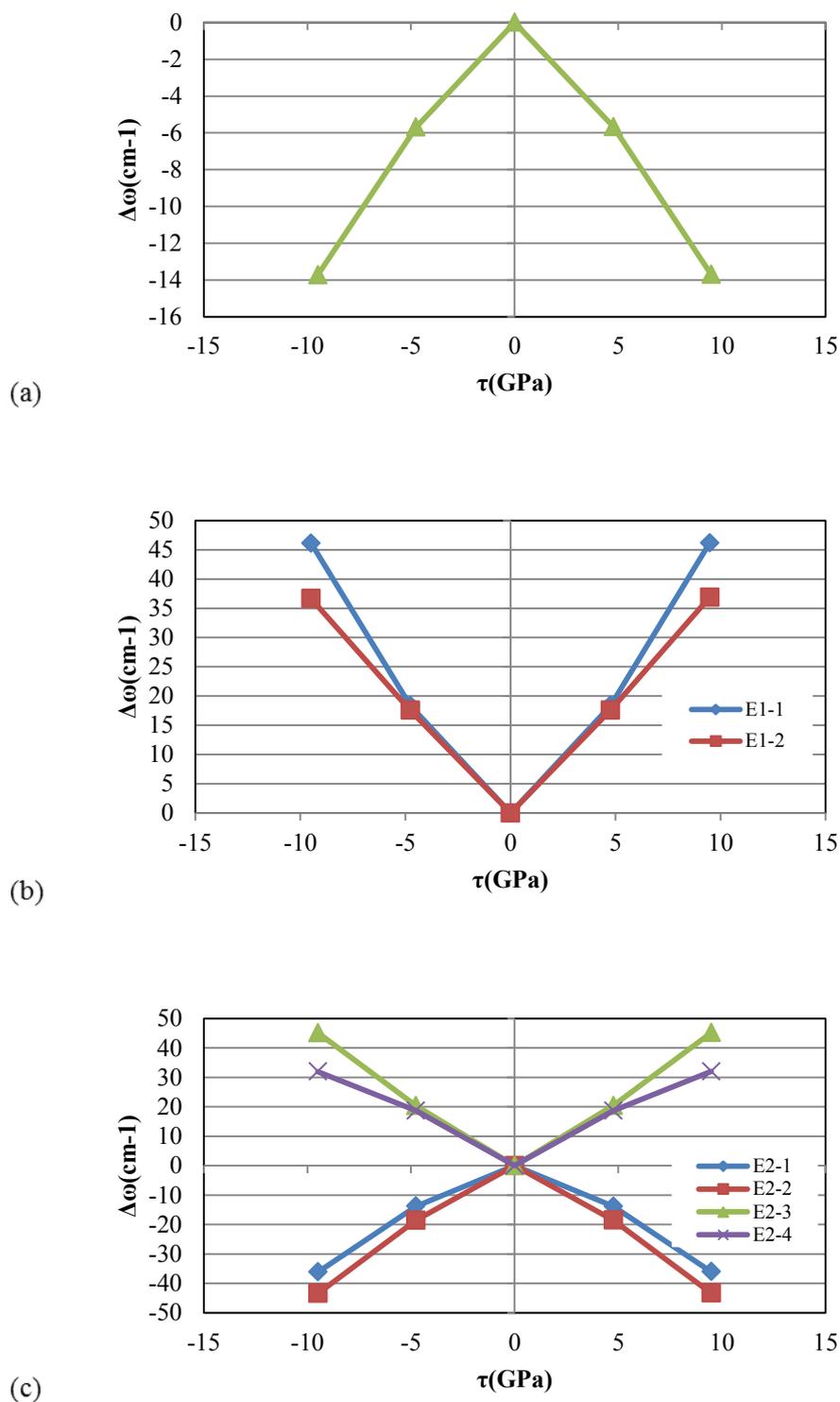


Fig 35. Calculated raman shift under shear stress $\tau_{xz} = \tau_{yz}$.
 (a)A1 mode (b)E1 mode (c)E2 mode

3.4 妥当性の評価

3.3.1において無応力下におけるフォノン振動数は誤差2%以下とある程度の妥当性を持つといえる。しかし応力への感度の妥当性としては、現在 4H-SiC のフォノン変形ポテンシャル係数の実験による計測データの報告はなく、実際に本研究において求められた値が正しいものであるかには疑問が残る。そこで本研究では第一原理計算によって算出された 4H-SiC の弾性定数と実験値の比較、および本研究で算出した 4H-SiC のフォノン変形ポテンシャルと報告されている 3C-SiC のフォノン変形ポテンシャル係数の比較によって妥当性の評価を行う。

3.4.1 弾性定数の比較

六方晶系単結晶体の応力テンソルと歪みテンソルの関係は一般に以下の式によって表される。

$$\begin{bmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} \\ \sigma_{xy} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ & c_{11} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ & & c_{33} & 0 & 0 & 0 \\ & & & c_{44} & 0 & 0 \\ sym & & & & c_{44} & 0 \\ & & & & & (c_{11} - c_{12})/2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_x \\ \varepsilon_y \\ \varepsilon_z \\ 2\varepsilon_{yz} \\ 2\varepsilon_{zx} \\ 2\varepsilon_{xy} \end{bmatrix} \quad (3.4)$$

CREE 社の 4H-SiC に対しては Kamitani によって室温における弾性定数 c_{ij} が求められており[15]、その値と比較するものとする。本研究の第一原理計算において一軸応力条件での各方向のひずみ量から弾性定数を算出する。Table 11 にその値を示す。値の誤差の原因としては第一原理計算の特性によるものだと考えられ、フォノン変形ポテンシャル係数もこの程度の誤差を含む可能性があることに注意が必要である。

Table 11. Elastic coefficients of 4H-SiC.

c_{ij}	弾性定数(GPa)	
	実験値 [15]	計算値
c_{11}	507	574.21
c_{33}	547	629.23
c_{12}	108	86.5
c_{13}	52	32.3

3.4.2 フォノン変形ポテンシャル係数の比較

Olego は立方晶である 3C-SiC に静水圧（三軸等方応力）をかけた際の TO フォノンの振動数を実験により取得し、静水圧と振動数 $\Omega_{\text{TO}}(\text{/cm})$ の関係を以下の式で表した[16] .

$$\Omega_{\text{TO}} = (796.2 \pm 0.3) + (3.88 \pm 0.08)X - (2.2 \pm 0.4) \times 10^{-2}X^2 \quad (3.5)$$

ここで X は静水圧(GPa)である. 本研究で評価した A1, E1, E2 はいずれも TO フォノンであり、振動数も 790cm^{-1} 程度であるため、この式における応力による振動数の変化の項と(3.2)を比較する. Fig 36 に(3.2)式と(3.5)式の静水圧によるシフト量変化を示す. 3C-SiC のシフト量は 4GPa においては(3.2)式の A1 モードと E2 モードの変化量の間収まっており、 10GPa 程度の大きな応力下においても非線形成分によって誤差が大きくなるものの 5%-10%程度の誤差である. 故に結晶性の違いから応力の異方性の影響はあるものの、妥当な値であると考えられる.

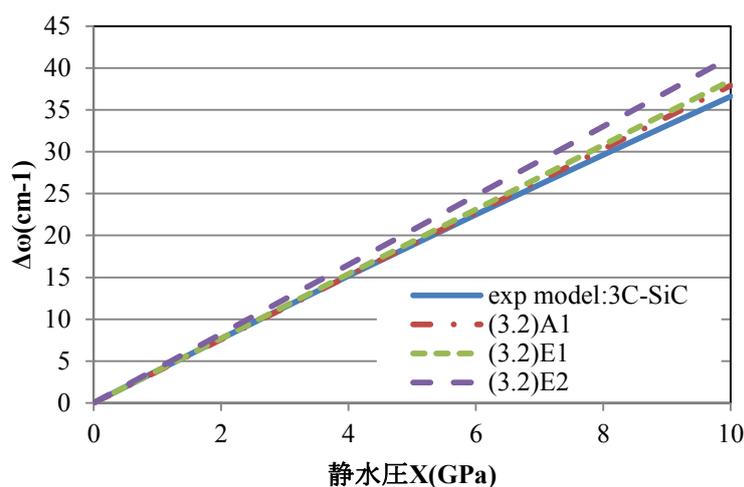


Fig 36. Comparison of 3C-SiC measured value and calculated value.

第4章 有限要素法による デバイス内部の応力評価

4.1 緒言

第2章において応力を実験によって評価するために、ラマン分光測定によりデバイス内部のラマンシフトを計測した。この章では応力を有限要素法解析によって評価する。解析によって得られた応力分布は第3章で得られたフォノン変形ポテンシャル係数を用いてラマンシフトに変換することによって、第2章の実験によるラマンシフトとの比較評価が可能となる。有限要素法は、実際には直接測定することのできない材料内部の応力を低コストで評価する上で有用な手法であり、現在広く用いられている。本章では本研究で行った各有限要素法解析の説明やモデリング、解析条件、解析結果について述べ、考察を行う。

4.2 解析の説明

ラマン分光法によるデバイス内部の応力評価には時間とコストが掛かり、数多く存在するデバイス一つ一つに対して行うことは難しい。そこで有限要素法を用いて評価することによって多くのデバイスに対して対応可能となり、またラマン分光法のみでは計測することのできない解像度での解析やせん断応力成分の算出も可能である。デバイスは前述のとおり各部材料の線膨張係数と実装温度が異なるため、熱応力が発生する。またそのほかにも四点曲げ試験によってデバイスにひずみが生じた際、デバイス各部の弾性定数の差から応力値およびひずみ量が異なる。本研究では電子顕微鏡写真をもとにデバイスのモデリングを行い、半導体の製造プロセスを再現することで熱応力、ドーピングによる真性応力、シリサイド化による応力を計算した。

解析結果の評価は、有限要素法により算出された応力に対して、第3章で算出したフォノン変形ポテンシャル係数を用いてラマンスペクトル変化量を求め、第2章で計測したラマンスペクトルと比較することで行う。

4.3 妥当性の評価

有限要素法による解析結果はその妥当性を評価する必要がある。本研究では有限要素法解析の結果を第 3 章のフォノン変形ポテンシャル係数を用いてラマンシフト量に変換し、第 2 章の Fig 16-Fig 18 のラマンシフト量と比較することによって評価を行う。これは応力が垂直応力 3 つとせん断応力 3 つの 6 つの成分を持つのに対し、今回評価しているラマンシフトは A1, E1, E2 の 3 つの値のみであるためである。

4.3.1 ラマンシフトの応力分布からの算出方法

ラマン分光測定におけるレーザー励起光のスポットは円形であり、本研究における測定では Table 6 に示すように $0.7\ \mu\text{m}$ のスポット径である。ゆえに取得されるラマン散乱光の振動数はスポット内フォノン振動数が平均化されたものであると考えられる。したがって本研究でも応力計算の算出結果をスポット径に従ってサンプリングし重み付けすることでラマンシフトを求める応力を算出するものとする。

Fig 37 に有限要素法解析結果の応力分布からラマンシフトを計算する際に用いるスポットとスポット内のサンプリング点の模式図を示す。中心を Table 6 の測定間隔に従って決定し、スポット径の円上の 8 点とスポット径の 1/2 の円上の 8 点の計 17 点をサンプリング点とする。一般に焦点におけるレーザー光の強度はガウス分布に従うため [17]、中心の強度が 1 に対してスポット径の円上における強度が $1/e^2$ となるよう規格化されたガウス分布に従って重み付けを行う。

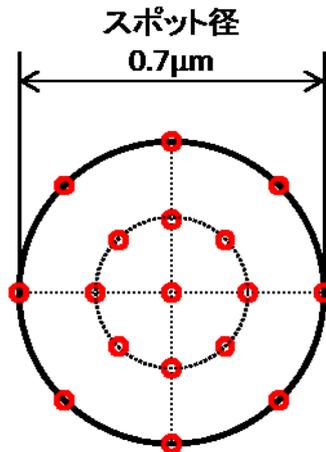


Fig 37. Position of sampling points in laser spot.

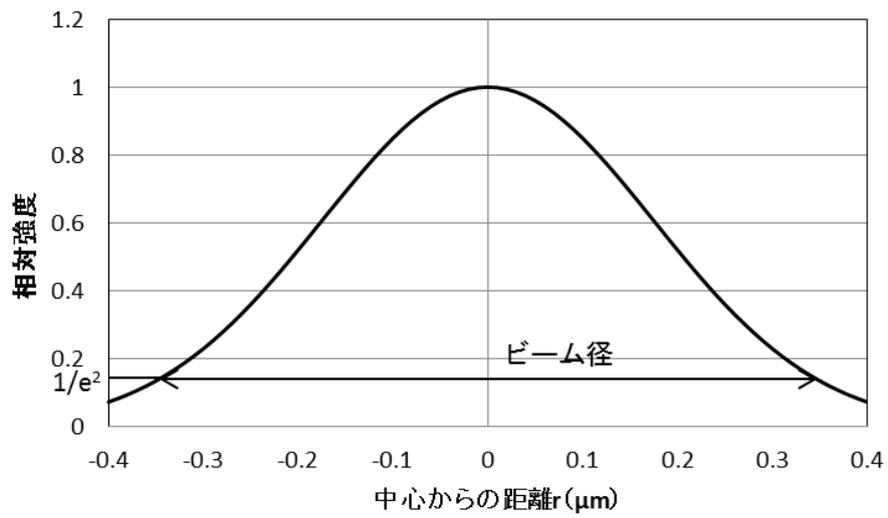


Fig 38. Normalized intensity distribution of laser beam spot

4.3.2 サンプルング点における応力の内挿

サンプルング点における応力の取得は、有限要素法解析によって算出された節点応力をアイソパラメトリック要素によって内挿することによって行う[18]。手順としてはまず、サンプルング点が含まれる要素を探索する。Fig 39 に要素の模式図を示す。要素内の位置(x,y)を以下の式で表す。

$$\begin{aligned}x(\xi, \eta) &= N_i x_i + N_j x_j + N_k x_k + N_l x_l \\y(\xi, \eta) &= N_i y_i + N_j y_j + N_k y_k + N_l y_l\end{aligned}\tag{4.1}$$

ここで x_i, y_i は節点の座標である (j, k, l も同様)。 N_i, N_j, N_k, N_l は形状関数であり以下の式で表される。

$$\begin{aligned}N_i &= \frac{1}{4}(1 - \xi)(1 - \eta) \\N_j &= \frac{1}{4}(1 + \xi)(1 - \eta) \\N_k &= \frac{1}{4}(1 - \xi)(1 + \eta) \\N_l &= \frac{1}{4}(1 + \xi)(1 + \eta)\end{aligned}\tag{4.2}$$

式(4.1)の要素内の位置(x,y)にサンプルング点の座標を、 x_i と y_i に節点の座標を入れて計算することにより (j, k, l も同様)、 (ξ, η) と形状関数を求められる。本研究ではニュートンラプソン法を用いて (ξ, η) を求めることによって、形状関数を算出した。サンプルング点の応力は形状関数を用いて以下の式によって内挿する。

$$\sigma(\xi, \eta) = N_i \sigma_i + N_j \sigma_j + N_k \sigma_k + N_l \sigma_l\tag{4.3}$$

この応力を Fig 40 のサンプルング点に対して求め、ガウス分布に従って加重平均化することによってスポットにおける応力とし、フォノン変形ポテンシャル係数を用いてラマンシフトの算出を行う。

実験ではラマンシフトは MOS 近傍の SiC 基板 $15\mu\text{m} \times 15\mu\text{m}$ の領域に対して計測されている。これは解析モデル約 4 つ分の幅に相当する。解析モデルの x,y 端部を鏡面对称として、ラマン分光測定で計測された領域に相当する部分の結果を算出するものとする。

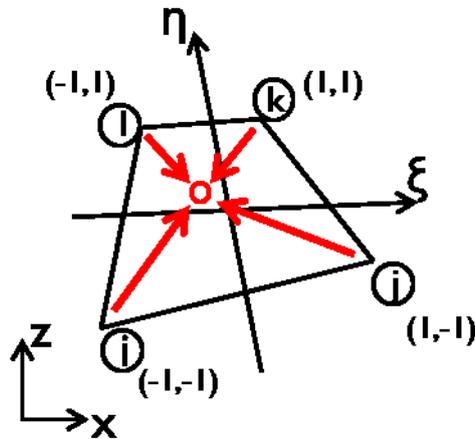


Fig 39. Diagram of element and nodes.

4.4 解析条件

Fig 8 の電子顕微鏡写真および Fig 10 の模式図をもとにモデルを作成する。Fig 7 に示したように、SiC チップの厚さは $180\mu\text{m}$ でありこのモデルは厚さ方向の長さを省略している。これは MOS 付近の影響とモデルの簡略化を考慮して、MOS 部に対して十分に長いと考えられる MOS 部の 5 倍程度の長さである $50\mu\text{m}$ とした。また MOS の奥行き方向(y 軸方向)への熱応力による膨張や伸縮、y 軸方向応力の影響を考慮するために三次元モデルとし、y 軸方向長さを $5\mu\text{m}$ とした。Fig 40 に作成したモデルを、Fig 41 に MOS 付近の拡大図を示す。また Table 12 に用いた各部材料のヤング率とポアソン比、Fig 44-Fig 43 に各材料の線膨張係数を示す。Fig 42 にモデルの上面図(z 軸正方向からの図)と境界条件を示す。熱応力などによって素子全体が膨張・収縮する現象を再現するために、片面は摩擦なし支持、向かい合う面は面が平面と角度を保ちながら動くようにカップリング拘束を施した。また最下面は摩擦なし支持によって拘束しており、最上面は拘束を施していない。メッシュは応力の評価に用い、電流への影響も大きいと考えられる SiC 基板部の MOS 周辺部を細かくし、応力への寄与の少ない Al や SiN 保護膜と、線膨張係数の差に起因する応力分布が比較的少ない SiC 基板の MOS から遠い部分は大きなメッシュサイズを用いている。最後に Table 13 に解析条件を示す。

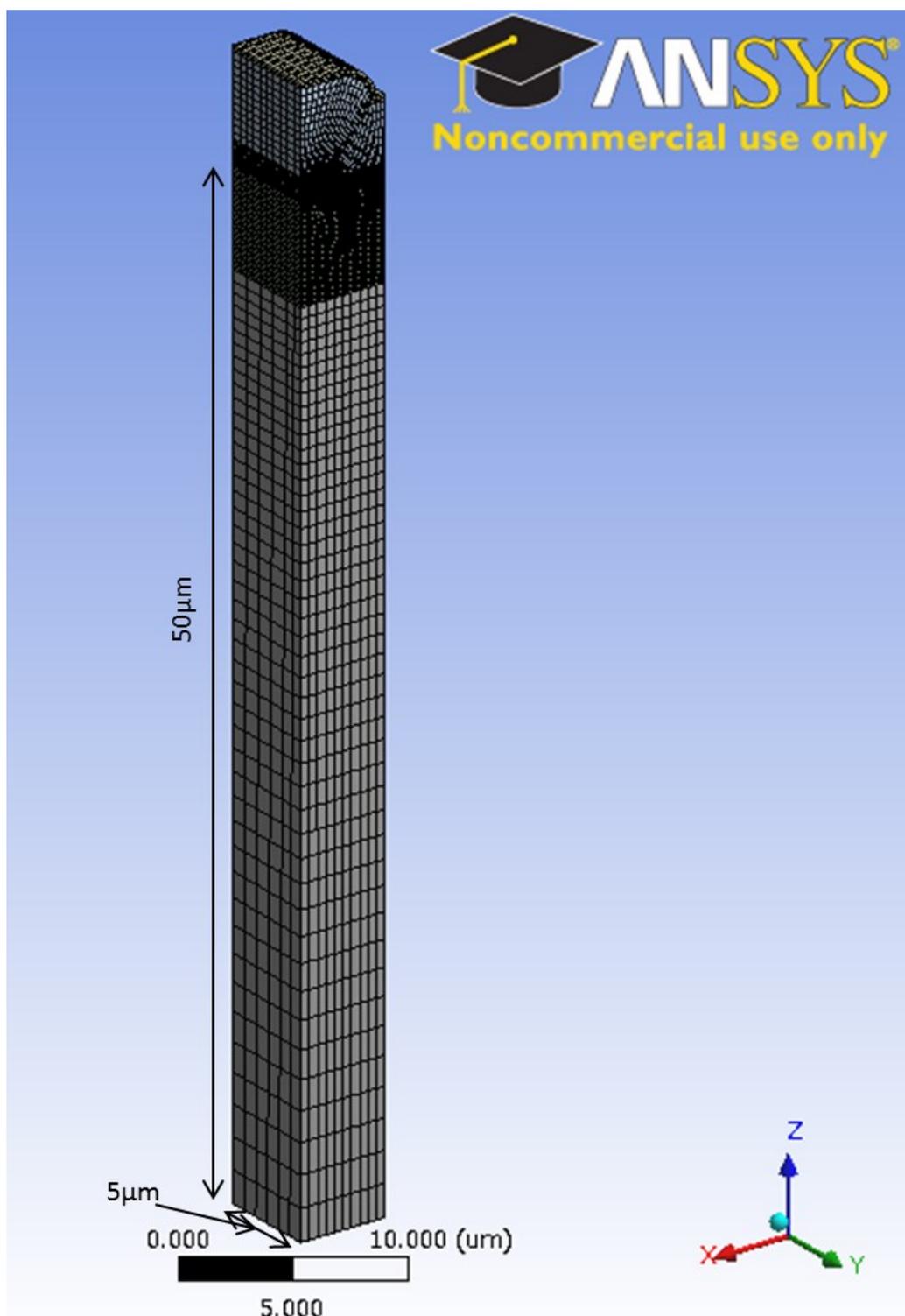


Fig 40. FE model of MOS device.

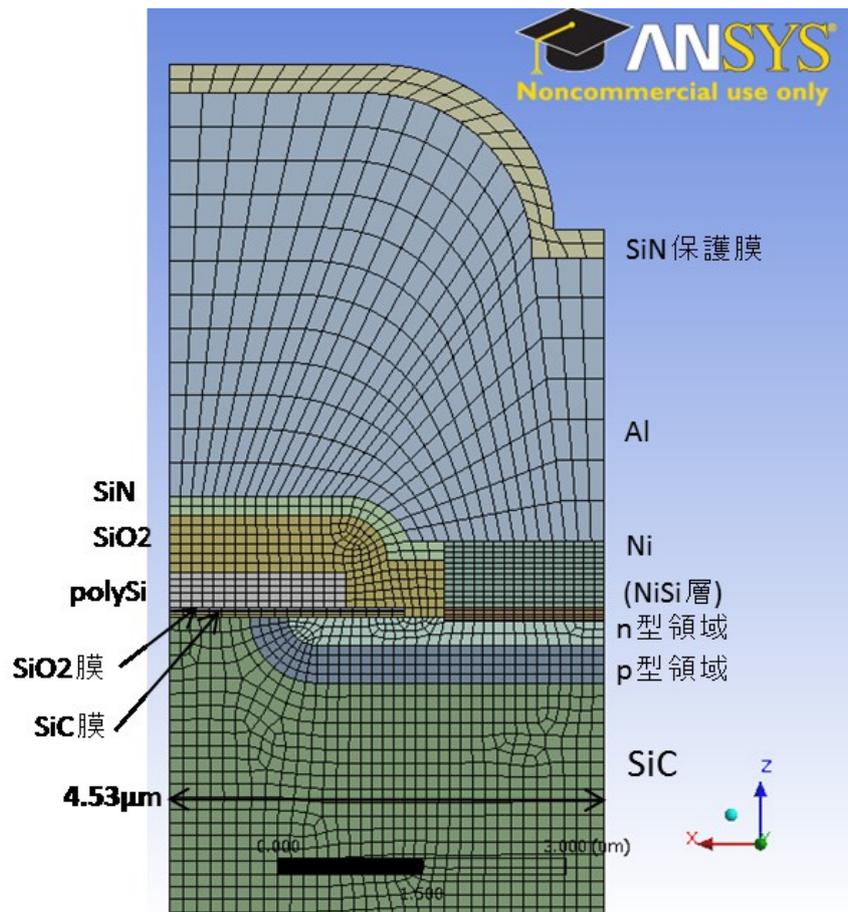


Fig 41. Detail FE model of MOS device.

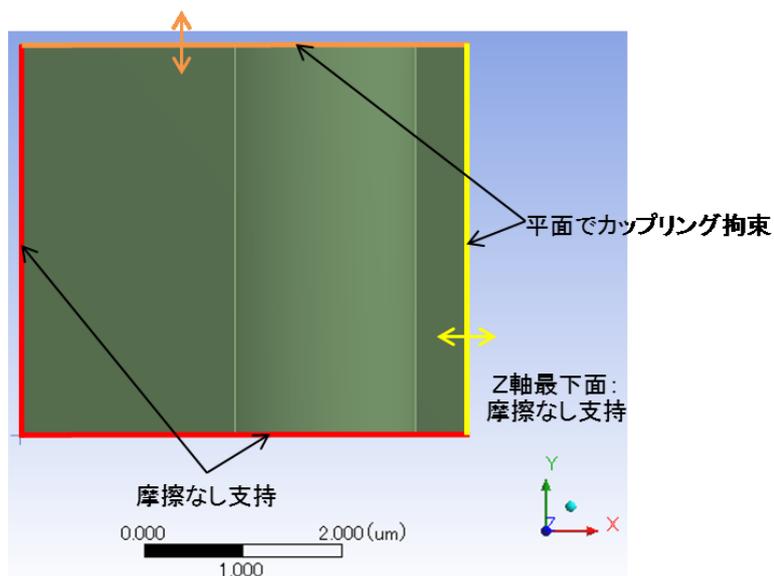


Fig 42. Top view and boundary conditions.

Table 12. Elastic coefficient of materials.

材料	ヤング率(GPa)	ポアソン比	線膨張係数($^{\circ}\text{C}$)	Ref
SiC	Table 11		Fig 43	[19]
SiN	280	0.28	Fig 46	[20]
SiO ₂	71	0.16	Fig 45	[20]
polySi	170	0.22	Fig 46	[20]
Ni	200	0.31	13.4×10^{-6}	[21]
Al	70	0.35	Fig 44	[21]

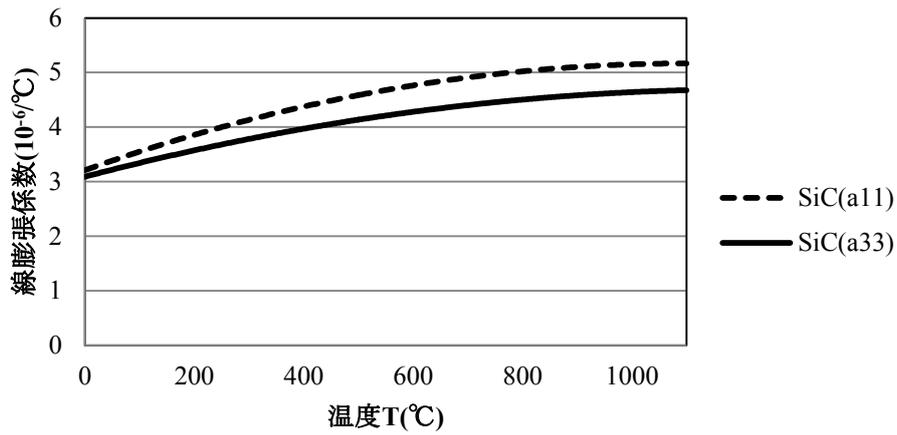


Fig 43. Thermal expansion coefficient of SiC[19].

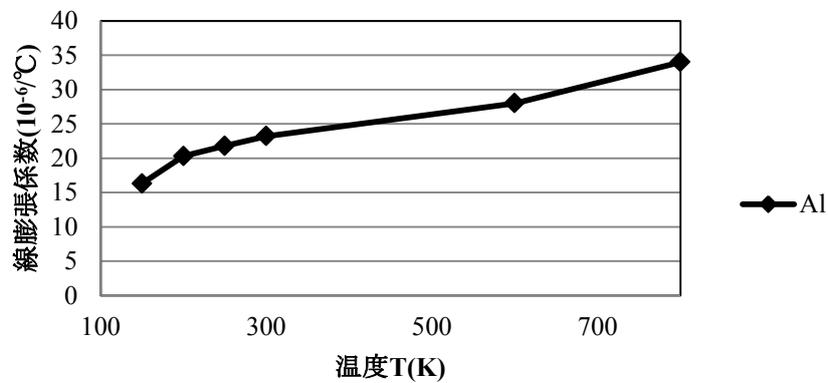


Fig 44. Thermal expansion coefficient of Al[21].

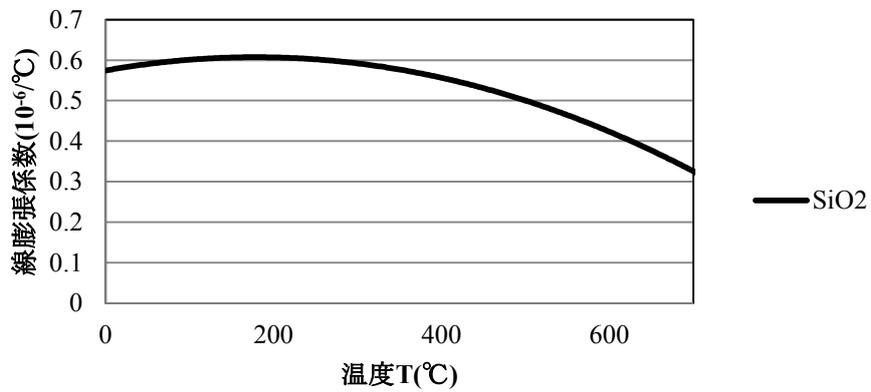


Fig 45. Thermal expansion coefficient of SiO2[20].

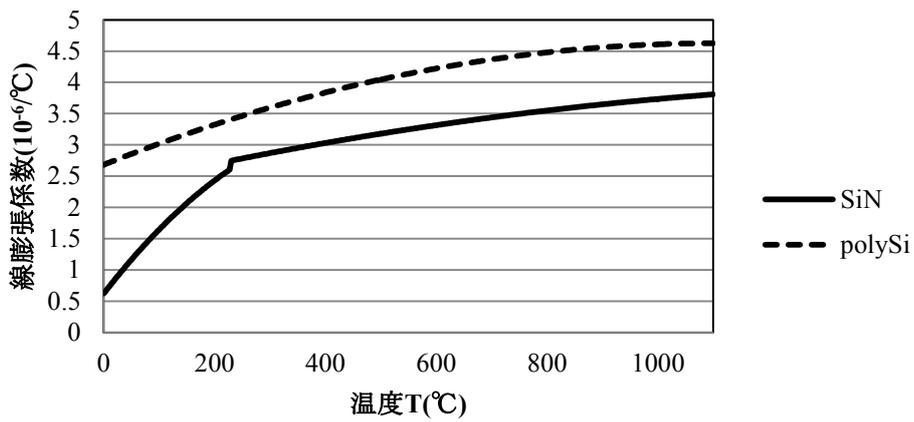


Fig 46. Thermal expansion coefficient of SiN and polySi[20].

Table 13. Analysis condition.

解析ソフト	ANSYS Workbench
解析手法	陰解法
単位系	[kg][μm][MPa][K]
要素数	26400
節点数	128470

4.5 多段階熱応力解析

本研究では半導体の製造プロセスを再現するために、多重ステップの熱応力解析を行う。Table 14 に想定される半導体の製造プロセスと成膜温度を、Fig 47 に成膜のプロセスフローを示す。ここで途中の熱処理等とドレイン電極の成膜プロセスは省略している。以下にプロセスの詳細を示す。

- (1) SiC ウェーハからエピタキシャル成長により基板を作成し、ドーピングを施す。
- (2) SiC に CVD による追加エピタキシャル成長によりチャンネル層を形成する。
- (3) 酸化によりゲート酸化膜を形成する。
- (4) LPCVD により p 型 polySi のゲート電極を形成する。
- (5) LPCVD により層間絶縁膜の SiO₂・SiN を形成する。
- (6) Ni のスパッタリングによりソース電極を形成する。
- (7) Al のスパッタリングによりパッド電極を形成する。
- (8) プラズマ CVD により保護膜の SiN を形成する。

このプロセスに従って系の温度を操作しながら構造を形成することで、発生する熱応力を適切に評価することができる。各解析ステップにおいて、形成前の膜は隣接部のひずみにしたがって自由に変形するような材料として計算し、形成後の膜は膜の材料の物性値に従って解析し変形や応力を評価するという手法によって膜の形成を模擬する。

Table 14. Formation temperature of materials.

	プロセス	想定成膜温度(°C)
1	SiC 基板作成, ドーピング SiC 追加エピ膜形成	
2	SiO ₂ 膜形成	900
3	polySi ゲート電極形成	600
4	層間絶縁膜 SiO ₂ ・SiN 形成	700
5	Ni のスパッタリング	22 (室温)
6	Al のスパッタリング	22 (室温)
7	保護膜 SiN 形成	300

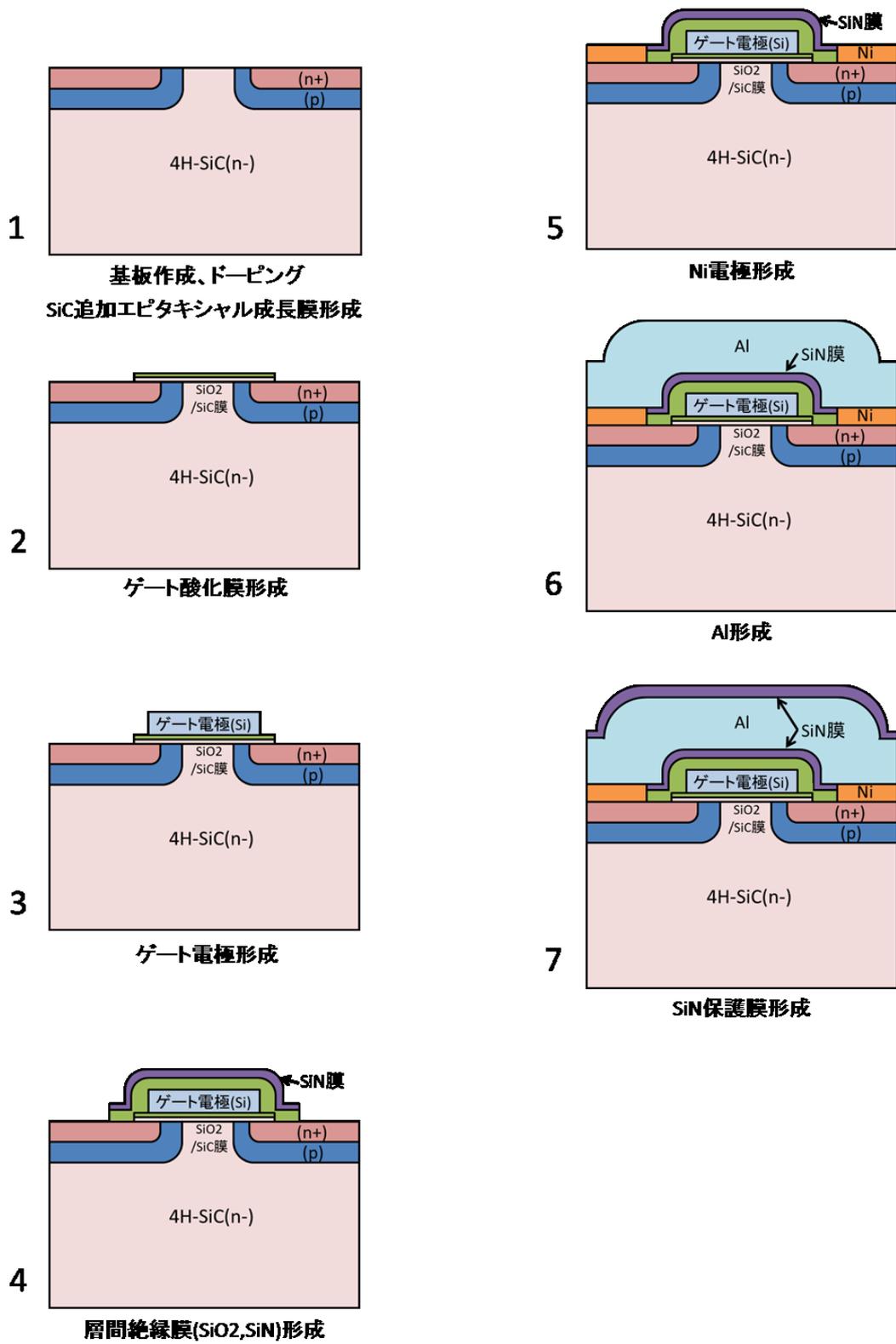


Fig 47. Process flow of SiC MOSFET.

4.6 解析結果

熱応力の評価

各ステップの熱応力による基板の最大主応力を Fig 48 に, 最小主応力を Fig 49 に示す. ステップ 1 は SiC のみからなっており温度差が生じても応力の発生が見られない. ステップ 2 において 900°C で形成された酸化膜が 600°C となり, 線膨張係数の差から圧縮応力が生じ, それに応じてソース直下にも圧縮応力が生じている. ステップ 3 において膨張を拘束された polySi に x 軸方向の圧縮応力が生じており, 逆に SiC 基板のゲート直下部には x 軸方向の引張応力が生じている. ステップ 4 においては層間絶縁膜が形成され, 線膨張係数差から絶縁膜内に主に圧縮応力が, SiC 基板はゲート直下に引張応力が, ソース直下に圧縮応力があらわれる. ステップ 5,6 でスパッタリングされる Ni と Al は常温で形成されるため, 最終的な応力への影響は少ない. またステップ 7 で形成される SiN 保護膜は SiC 基板と Al 膜を挟んで距離があるため, 最終的な応力への影響は少ない. 最終的な残留応力としては最大 400MPa 程度の引張応力がゲート部直下に, 数十 MPa 程度の圧縮応力がソース部直下に生じている. この結果は第 2 章のラマン分光測定結果から言える定性的な傾向と異なる. 従って以降では他の応力要因の影響を考えるものとする.

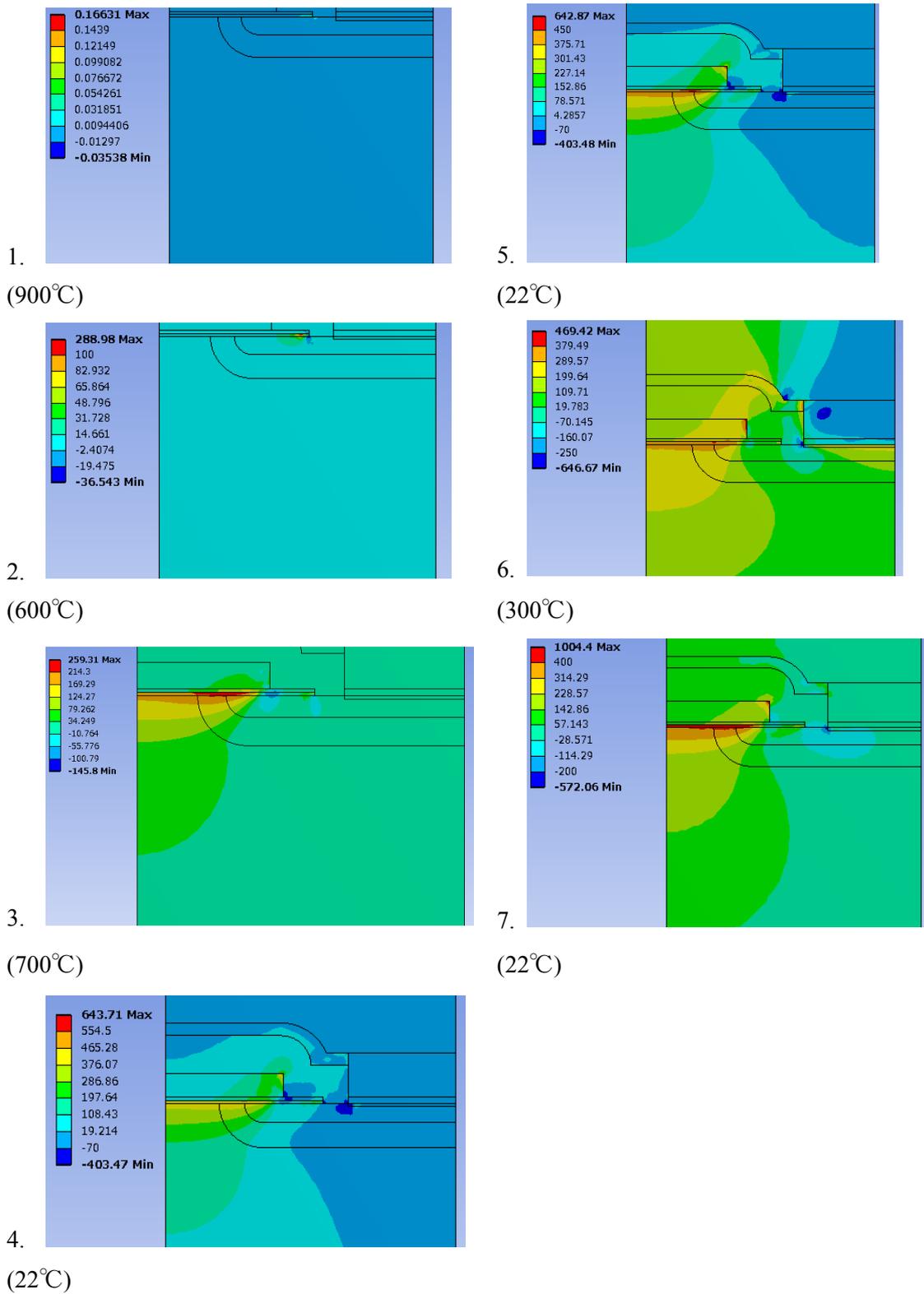


Fig 48. Maximum principal stress of each analysis step.

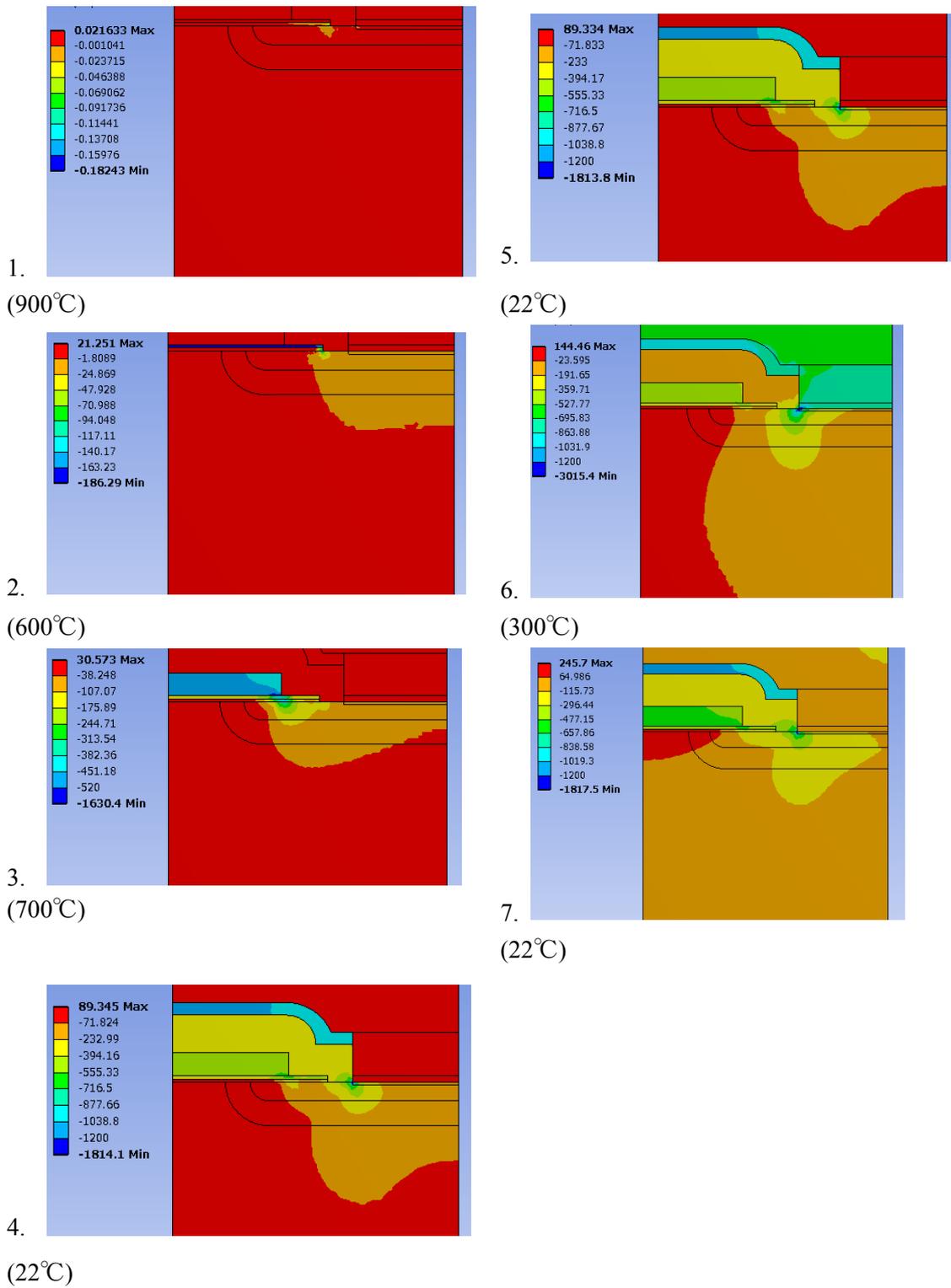


Fig 49. Minimum principal stress of each analysis step.

ドーピングによる真性応力の考慮

ドーピングに起因する応力を検討する.

ドーピングでは不純物を半導体材料中に注入し, その後活性化アニールを行うことで壊れた結晶構造を回復する. 不純物が SiC の原子と置換されると不純物の平衡原子間距離と SiC の平衡原子間距離の差からひずみが発生する. このひずみによる応力は以下の式によって表される.

$$\sigma_f = \frac{E_{\text{SiC}}}{1 - \nu_{\text{SiC}}} \cdot \frac{2r_{\text{Si-C}} - (r_{\text{Si-C}} + r_{\text{imp}})}{r_{\text{Si-C}} + r_{\text{imp}}} \cdot \frac{N_{\text{imp}}}{N_{\text{SiC}}} \quad (4.4)$$

ここで N_i は濃度, r_i は共有結合半径, E_{SiC} は SiC のヤング率, ν_{SiC} はポアソン比を表す. ドーピングとして想定しているアルミニウム Al(P 層)とリン P(N 層)の平衡原子間距離を Fig 50 に示す. また各ドーピング層および SiC の濃度を Fig 51 に示す.

Fig 50. Covalent radius of SiC / Impurity.

	Si	C	Al	P
共有結合半径(pm)	111	77	118	106

Fig 51. SiC / Impurity concentration.

	SiC	P 層	N+層
濃度(/cm ³)	4.83×10^{22}	2.0×10^{17}	1.0×10^{20}

この式に基づいて応力を計算すると, P 層に生じる応力は数 MPa, N+層に生じる応力は 75MPa 程度と見積もられる. 従って P 層に 10MPa, N+層に 75MPa の初期応力を与えて解析を行うものとする.

シリサイド化による応力の考慮

ソース部直下の応力が異なる原因としてシリサイド化の影響が考えられる。電流はソース電極と半導体の接合面を介して流れるが、デバイスの信頼性を向上するためには接合部の抵抗を低く抑える必要がある。またソース電極である金属と SiC 半導体を接合した際に形成されるショットキー障壁[22]を取り除き、接合部の電圧-電流特性が直線性（オーミック性）を示すものとする必要がある。シリサイド化とはソース電極と半導体の界面の接触抵抗を低減させオーミック接触を形成するために、ソース電極の金属材料と半導体を反応させ界面にシリサイド層を形成させることである。SiC 半導体へのシリサイド形成による応力の発生に関する研究の報告例は少ないが、Si に対する Ni のシリサイド形成により数百 MPa 程度の引張真性応力がシリサイド層に発生するという報告があるため[23]、SiC デバイスにおいても比較的大きな引張応力が発生しているものと考えられる。本研究では Ni と SiC の界面に 200MPa の引張応力が生じるように解析条件の設定を行った。ここで、有限要素法解析で途中のステップにおいて積層された Ni の SiC との界面付近に対して初期応力を設定することは難しいため、積層温度を調整することにより熱応力を用いてシリサイド化による真性応力を模擬した。

Fig 52 に熱応力とドーピング応力、シリサイド化に起因する応力を考慮した最大/最小主応力を示す。どちらも熱応力の場合と比較してドーピング層周辺への 60MPa 程度の圧縮応力とシリサイド層への 200MPa 程度の引張応力が生じているが、大きな傾向の変化は見られない。Fig 53 に応力分布から算出したラマンシフト量分布と実験によるラマンシフト量を示す。有限要素法解析から算出した値は実験による値と比較して 3~4 倍程度大きい傾向にある。これは解析による応力の絶対値が大きいことに起因するものである。またソース電極の直下に相当する水平方向 7~8 μm 部の傾向は似ているものの、ゲート電極直下に相当する水平方向 4 μm 周辺と 11 μm 周辺は傾向が逆になっている。これはゲート電極や酸化膜の製膜時に生じているミスフィットなどに起因する真性応力が発生していることが考えられる。ラマン分光測定の結果と本研究の結果の差からゲート周辺の膜に対して数十~数百 MPa 程度の引張の真性応力が生じている事が考えられる。また、本研究で想定したプロセス以外の未知のプロセスが製造時に用いられており、ゲート直下に圧縮応力が発生している可能性があることにも注意が必要である。

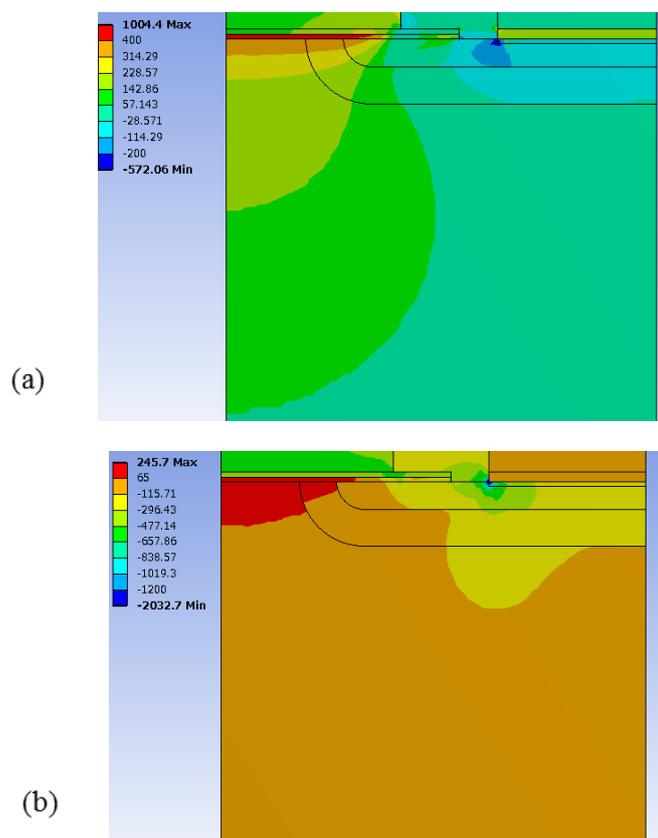


Fig 52. Residual stress (a)Maximum principal stress (b)Minimum principal stress

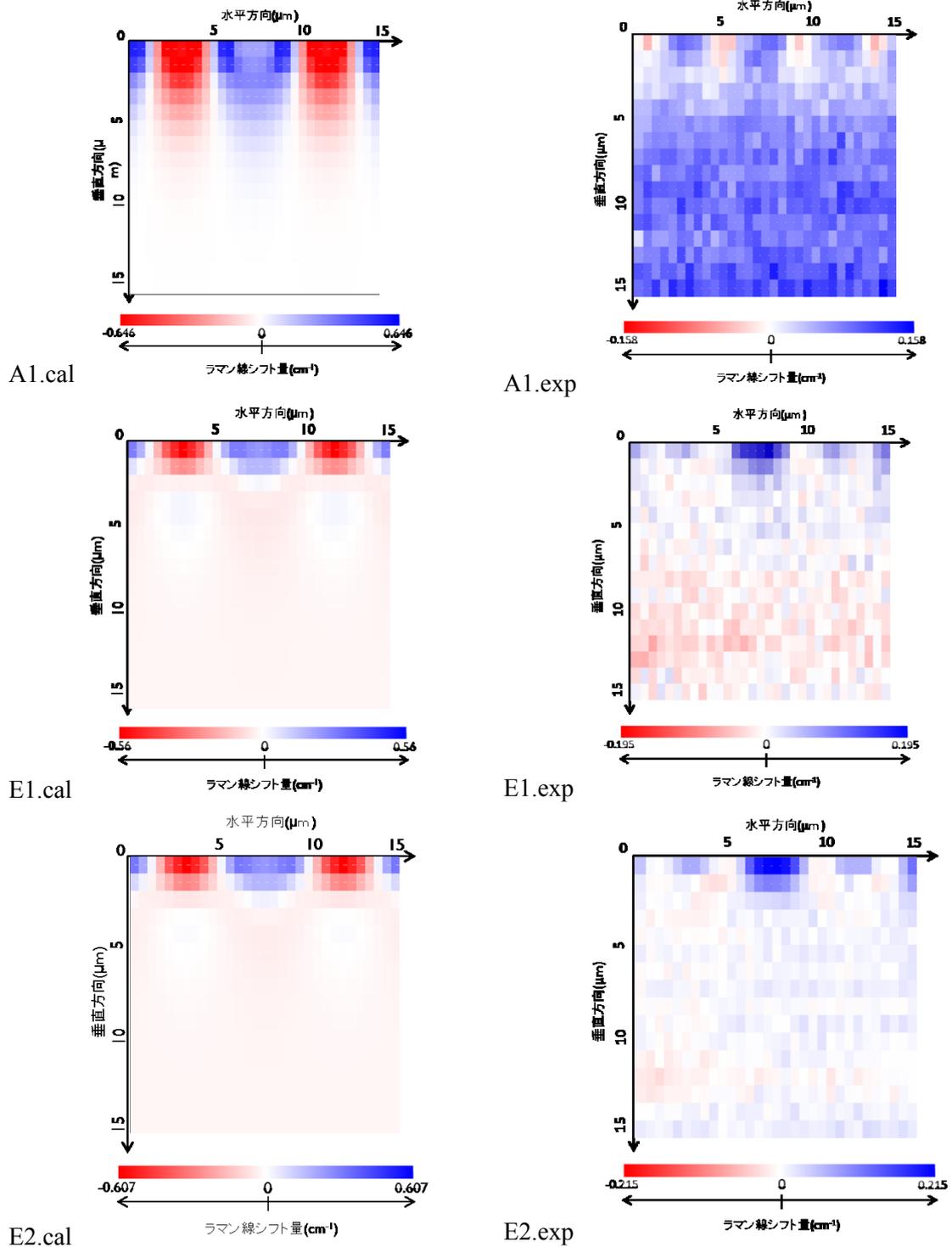


Fig 53. Raman shift distribution (cal) calculation (exp) experiments

第5章 結論

本章では, 本研究で得られた知見についてまとめ, その後今後の展望について述べる.

5.1 結論

本研究では未知の物性値であった 4H-SiC のフォノン変形ポテンシャル係数を, 第一原理計算を用いて導出した. この係数によって, 二軸等方応力や三軸等方応力, 一軸応力といった仮定のもとにおいては, ラマン分光法によって得られる 4H-SiC のラマンシフトから応力を評価することが可能となった. またせん断応力が十分に無視できる位小さい条件において, 4H-SiC の応力分布からラマンシフト量を評価することが可能となった.

ラマン分光測定によって SiC MOSFET 内部に生じる応力の評価を行った. ソース部の直下とゲート部の直下に c 軸と垂直方向に数十 MPa 程度の応力が生じていると考えられる.

有限要素法解析により基板の熱応力及び真性応力を, 多段階熱応力解析を用いて評価する技術を確立した. そして解析によって算出された応力分布から, 応力の内挿, 重み付け平均化, フォノン変形ポテンシャル係数による変換によってラマン分光測定で得られるラマンシフト分布を導出する技術を構築した. ラマン分光計測によって得られた結果と有限要素法解析の比較によって, 熱応力, ドーピング応力, シリサイド化による応力の他に, 生じていると考えられるゲート電極や絶縁膜の真性応力に関して提言を行った.

5.2 今後の展望

第一原理計算によってラマンシフトと応力の関係を算出した。しかし、4H-SiC の実験値との比較はしておらず、十分な妥当性の評価は行っていない。実際に各軸方向に応力をかけた 4H-SiC に対してラマン分光測定を行うことによって実験値を取得し妥当性の評価を行う必要がある。またせん断応力の評価は十分にできておらず、せん断応力成分の影響をより適切に求めることができるラマンシフト-応力変換式の導出が、ラマン分光測定による応力評価のために必要であると考えられる。

有限要素法解析によってデバイスの残留応力を評価した。より適切な応力評価のために、薄膜の真性応力をそり測定試験などにより求める必要があるといえる。これによりゲート部やソース部などの真性応力が評価されれば有限要素法解析の入力として解析を行うことで、より妥当な応力評価が可能となると考えられる。また本研究で用いた SiC チップは製造プロセスが秘匿されているため仮定を含んでおり、製造プロセスが判明しているデバイスを用いることで熱応力などをより適切に評価することができると考えられる。

付録 A：四点曲げ解析

A. 1 緒言

デバイスの電気特性の応力依存性を評価するために、東芝によって四点曲げ試験が行われた。これはデバイスを接合した銅基板に四点曲げを用いてひずみをかけ、ドレイン電圧-電流曲線を取得することによって、ひずみの電気特性への影響を評価することによって行う。この時のひずみはひずみゲージによって取得するが、ひずみゲージ上のひずみ量と SiC チップ上のひずみ量は異なる。またデバイスにはドレインやソースに通電するためのワイヤを接続する必要があり、デバイス上にひずみゲージを直接設置することは難しい。SiC チップ上に生じたひずみを適切に評価するために有限要素法解析を用いて、ひずみゲージ上のひずみとチップ上のひずみの関係を求める。その後、得られたひずみを MOS 応力解析の境界条件として用いることでゾーミング解析を行う。

A. 2 四点曲げ試験の概要

東芝によって行われた四点曲げ試験についての説明を行う。デバイスへの応力印加試験は、前述のとおり四点曲げによりデバイスにひずみを与えた状態で通電しドレイン電圧-電流の関係を計測することによって行う。Fig 54 に四点曲げ試験機の模式図を、Fig 55 に四点曲げ試験を行う基板の模式図を示す。ソース電極およびゲート電極は SiC チップ上面から、ドレイン電極は Cu 基板から引き出す。Fig 55 において(a)がチップを縦向きにおいた条件、(b)がチップを横向きにおいた条件の模式図であり、それぞれ素子にかかる応力の方向が異なるため電気特性の変化も異なる。また SiC チップと Cu 基板の間は厚さ $20\mu\text{m}$ の AuGe 接合材にて接合しているものとする。これは AuGe がチップ及び基板が 200°C 以上の高温となる時にも溶けず、降伏応力が Cu 等と比べると低いために線膨張係数の差から熱応力が発生する際にも塑性変形することによって接合部の応力を緩和することが可能な材料であり、比較的電気抵抗も低い半導体のボンディングに適した材料であるためである[24]。以降は便宜的に(a)の配置を「縦条件」、(b)の配置を「横条件」と呼ぶものとする。

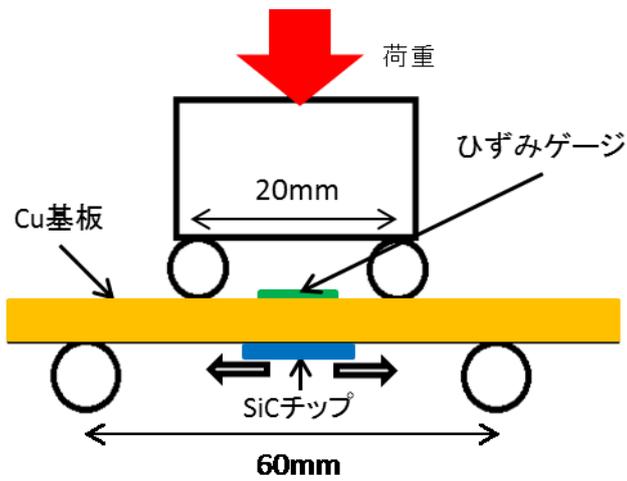


Fig 54. Four-point bending machine.

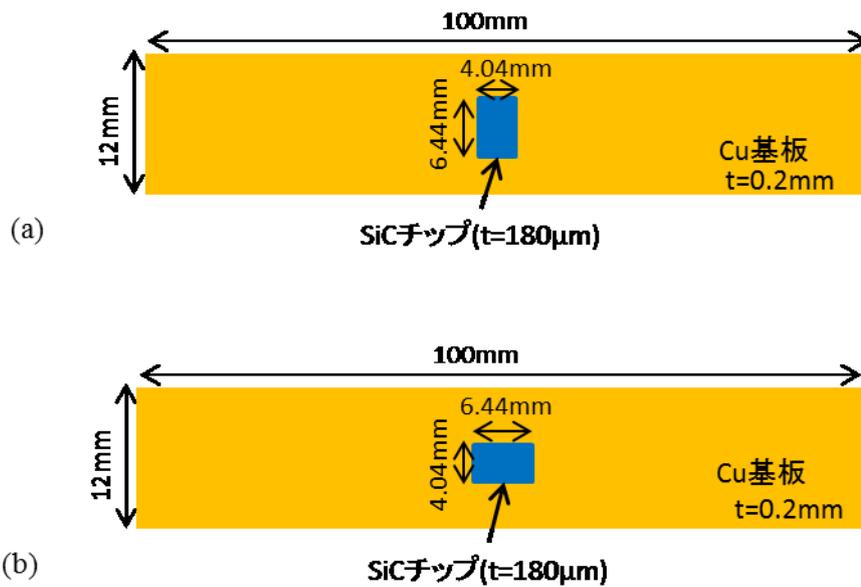


Fig 55. Four-point bending specimen.
 (a)longitudinal condition (b)lateral condition

A. 3 解析条件

Fig 54 および Fig 55 をもとに有限要素法モデルを作成し解析を行う。この時構造の対称性を考慮して 4 分の 1 モデルとした。Fig 56 に作成した縦条件モデルの(a)上面図と(b)SiC チップ付近の側面図を、Fig 57 に作成した横条件モデルの(a)上面図と(b) SiC チップ付近の側面図を示す。本解析で取得したいのはひずみゲージ上のひずみと SiC 半導体チップ上のひずみの関係であり、また Cu 基板の中央部と SiC チップおよび AuGe 接合材付近は構造が比較的複雑で応力が集中しうするため、ひずみの評価精度を高めるためにメッシュを細かく切っている。Table 15 に使用した各材料の物性値を示す。ひずみの評価は、ひずみゲージのひずみに相当する値として Cu 基板の SiC チップが接着されていない方の面の中心部、SiC チップのひずみに相当する値としては SiC チップ表面の中心部で行う。

Table 15. Physical properties of materials used in four-point bending calculation.

材料	弾性定数(GPa)	ポアソン比	Ref
SiC チップ	Table 11		
AuGe	70	0.32	[25]
Cu	110	0.35	[25]

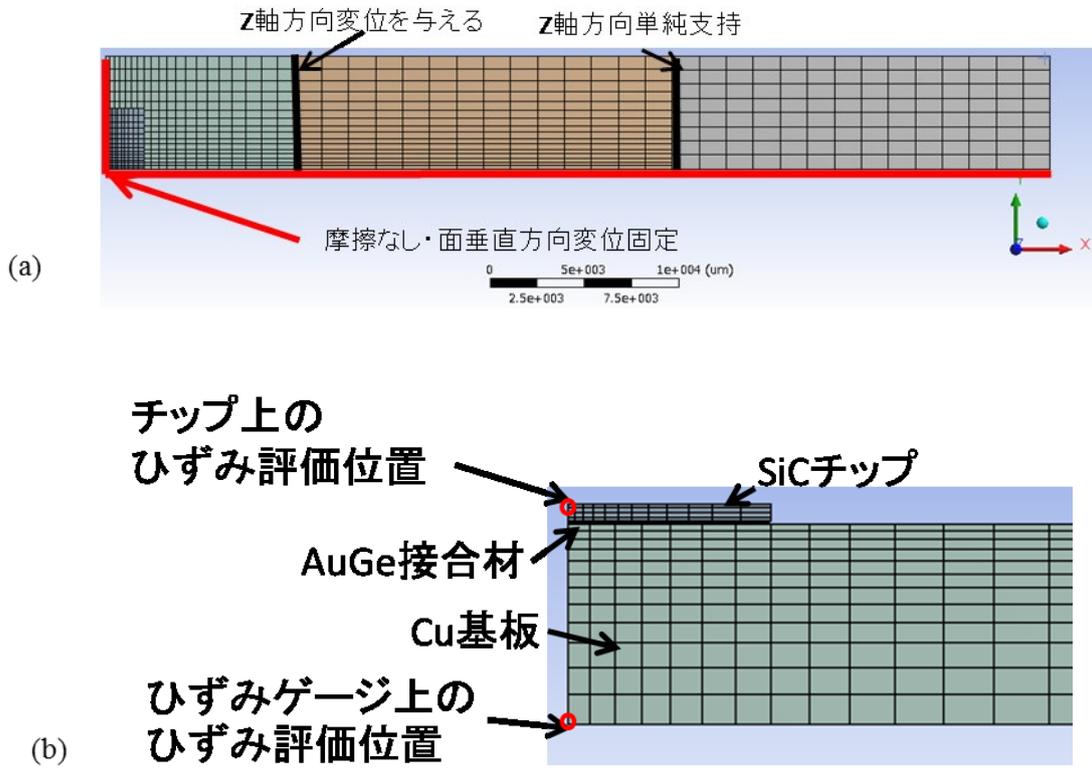


Fig 56. Longitudinal condition FE Model of four-point bending (a)top view (b)side view.



Fig 57. Lateral condition FE Model of four-point bending (a)top view (b)side view.

A. 4 解析結果

Fig 58 にひずみゲージ上のひずみと SiC チップ上面に実際に生じるひずみ量の関係を示す。このグラフから以下の関係式が得られる。

$$\begin{cases} \varepsilon_{x,SiC} = -0.666\varepsilon_{gauge} \\ \varepsilon_{y,SiC} = 0.225\varepsilon_{gauge} \end{cases} \quad \text{(縦条件)} \quad (0.1)$$

$$\begin{cases} \varepsilon_{x,SiC} = -0.76\varepsilon_{gauge} \\ \varepsilon_{y,SiC} = 0.257\varepsilon_{gauge} \end{cases} \quad \text{(横条件)}$$

ここで ε_{SiC} は SiC 上面におけるひずみ、 ε_{gauge} はひずみゲージ上のひずみを示す。ここでの x と y は四点曲げ解析における座標系であり、ゾーミング解析で残留応力解析の境界条件としてひずみを用いる際には縦条件か横条件かを考慮してデバイスにひずみかける必要がある。Cu 基板の厚さが SiC チップに対して十分厚くないため、厳密には SiC チップの上面と底面で生じるひずみは異なる。しかし SiC チップ上面に近い MOS 周辺部のひずみは SiC チップ上面のひずみに近く、MOS から離れた基板のドリフト層のひずみは残留応力の影響が少ないため、残留応力を用いずに四点曲げのひずみによって評価が可能であると考え。以上の理由からゾーミング解析に用いる四点曲げによるひずみは SiC チップ上面のひずみをもって行うものとする。この式によって算出されるひずみを、四点曲げによるデバイス部分の有限要素法解析の境界条件として用いる。

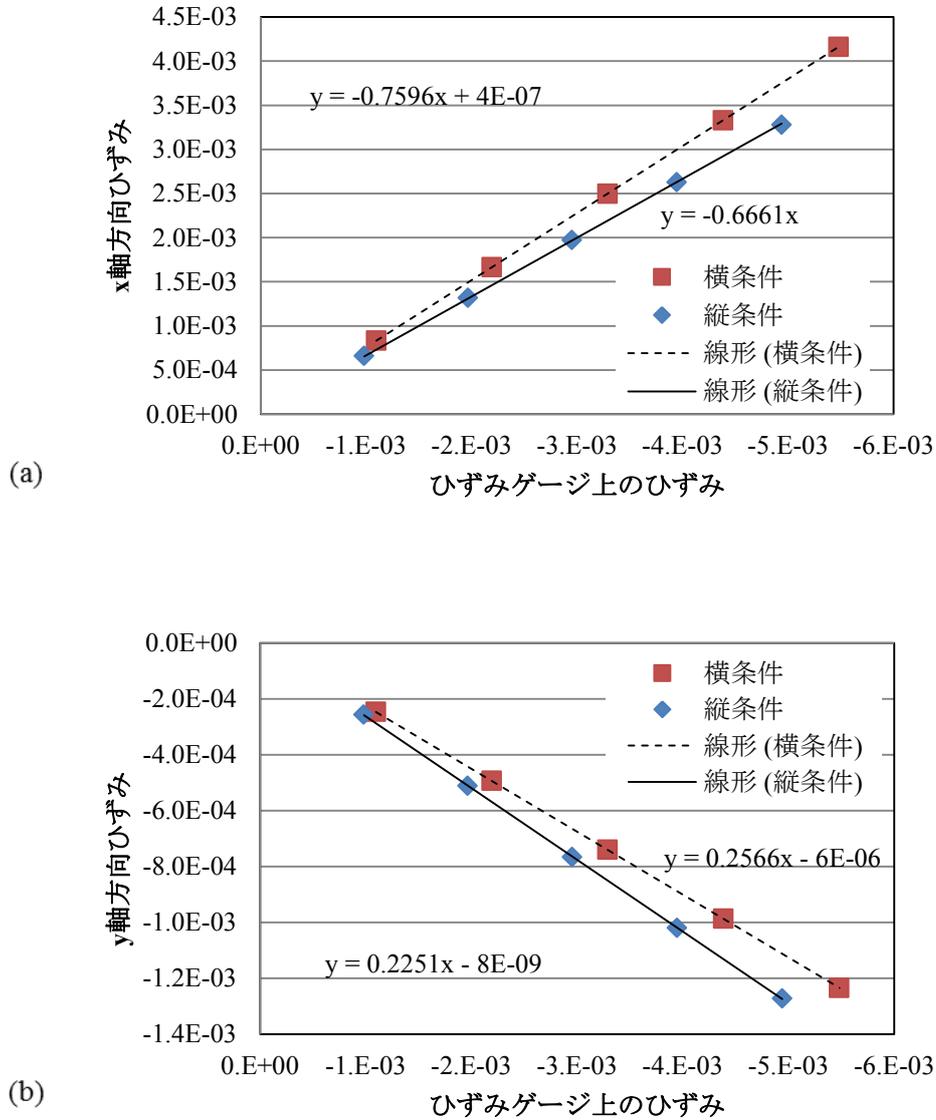


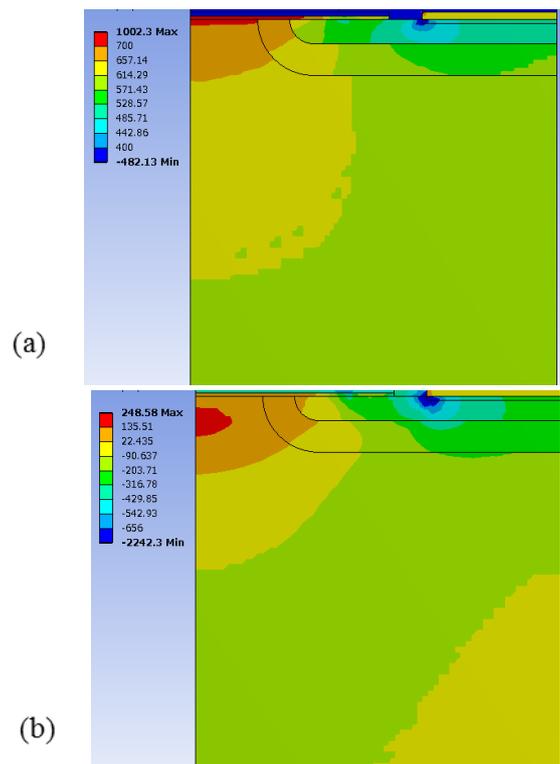
Fig 58. Relationship between strain on gauge and strain on SiC chip.
(a)x-axial strain (b)y-axial strain

A.5 ズーミング解析例

ここではズーミング解析の例としてひずみゲージ上のひずみ（圧縮）が 0.2%であった時の縦条件と横条件におけるそれぞれのチップにかかる応力を評価する。

A.5.1 縦条件

縦条件では四点曲げ解析における x 軸方向は残留応力解析における y 軸方向, 四点曲げ解析における y 軸方向は残留応力解析における x 軸方向である. ひずみゲージ上のひずみが 0.2%であった際の残留応力解析における座標でのひずみは, $\varepsilon_x = -0.00045$, $\varepsilon_y = 0.00133$ と求められる. このひずみを境界条件として解析を行った. Fig 59 に残留応力評価にひずみの境界条件を導入して得られた最大主応力と最小主応力を示す. 四点曲げ試験によってデバイスには y 軸方向に引張のひずみを与えられ, x 軸方向の圧縮ひずみはポアソン効果に基づいて発生するものであるため, 最大主応力は全体的に上昇し, 最小主応力はあまり変わらない.

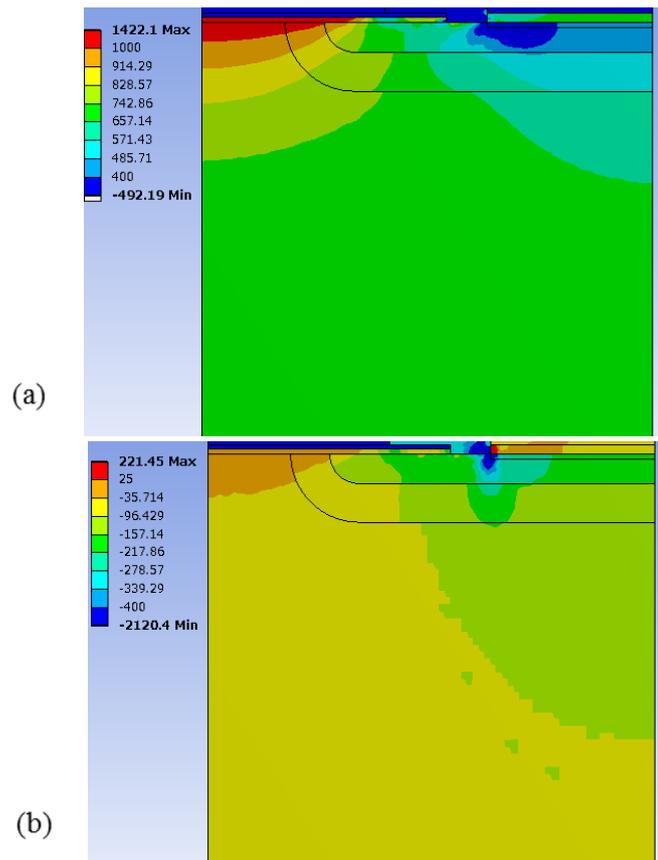


**Fig 59. Stress distribution considering four-point bending strain (longitudinal condition).
(a)Maximum principal stress. (b)Minimum principle stress.**

A.5.2 横条件

横条件では四点曲げ解析における x 軸方向は残留応力解析における x 軸方向, 四点曲げ解析における y 軸方向は残留応力解析における y 軸方向である. ひずみゲージ上のひずみが 0.2%であった際の残留応力解析における座標でのひずみは, $\varepsilon_x = 0.00152$, $\varepsilon_y = -0.000514$ と求められる. このひずみを境界条件として解析を行った. Fig 60 に残留応力評価にひずみの境界条件を導入して得られた最大主応力と最小主応力を示す. 基板においては y 軸方向の応力はさほど大きくなく, xz 平面での応力が支配的であるため, y 軸方向に引張応力をかける縦条件よりも x 軸方向に引張応力をかける横条件の方が, 最大主応力が大きく算出されている.

このようにして得られた応力分布を入力としてキャリアの移動度を計算しデバイスシミュレーションを行うことで電気特性を評価し応力の電気特性に与える影響の評価を行う.



**Fig 60. Stress distribution considering four-point bending strain (lateral condition).
(a)Maximum principal stress. (b)Minimum principle stress.**

付録 B：デバイスシミュレーションによる電気特性変動評価

B.1 緒言

本研究の最終的な目標は、これまでに求めた SiC 半導体内部の応力を入力として、デバイスシミュレーションで電気特性を算出することによって、SiC デバイスの構造や物性値を入力としてデバイスへのデバイスの電気特性を求める事ができるような技術確立することである。本研究では半導体理工学センター(STARC)の TCAD である HyENEXSS の、デバイスシミュレーション機能である HyDeLEOS をもちいて SiC に対する解析モデルの構築を行った。

B.2 使用モデル

デバイスシミュレータで使用するモデルについて概説する。HyENEXSS は基本方程式の他にキャリアの移動のしやすさを表す移動度モデルと、キャリアの生成や再結合を再現するキャリア結合・再生成モデルがあり、これらに対応するモデルパラメータや物理量を Si のものから SiC に置換することで SiC 材料のデバイスを再現する。Table 16 に採用したモデルパラメータを示す。以下のモデル式中の特に説明のないパラメータはモデルパラメータである。また参考文献のついていないパラメータについてはシミュレータで予め用いられていたパラメータである。

B.2.1 基本方程式

基本方程式には一般的なデバイスシミュレータに導入されている、場の誘電率と電荷密度から電位を導出するポアソン方程式、電子密度と正孔密度を導出するための電流連続式等を採用している。

B.2.2 移動度モデル

この項では、移動度を扱うモデルについて説明する。

LatticeScatt モデルは格子温度の影響を移動度に導入するモデルである[26]。以下にモデル式を示す。

$$\mu_T(T) = \mu_0 \left(\frac{T}{T_0}\right)^{-\alpha} \quad (0.1)$$

ここで T は格子温度、 μ_T は格子温度を考慮した移動度である。本研究では室温における解析を行うため温度による移動度の変化はないが、今後高温下での稼働を想定した解析を行う上では必要なモデルである。

Masetti モデルは不純物濃度による移動度の低下を再現するためのモデルである[27]。以下にモデル式を示す。

$$\mu_{NT}(N, T, \mu_T) = \mu_{\min} + \frac{\mu_T - \mu_{\min}}{1 + \left(\frac{N}{N_0}\right)^\gamma} \quad (0.2)$$

ここで N はキャリア不純物の濃度である。

Lombardi モデルは格子振動による散乱や界面のラフネスによる散乱などによる移動度の低下を再現するためのモデルである。以下にモデル式を示す。

$$\mu_p(E_\perp, N, T, \mu_{NT}) = \left(\frac{1}{\mu_{NT}} + \frac{1}{\frac{b}{E_\perp} + \frac{c1 \cdot N^{c2}}{T \cdot E_\perp^{c3}}} + \frac{E_\perp^{c4}}{\delta} \right) \quad (0.3)$$

ここで E_\perp は垂直電界である。

Caughey-Thomas モデルはキャリアのドリフト速度の飽和を再現するモデルである。以下にモデル式を示す。

$$\mu_{CT}(E_\parallel, T, \mu_p) = \frac{\mu_p}{\left[1 + \left(\frac{\mu_p E_\parallel}{V_{\text{sat}}} \right)^\beta \right]^{\frac{1}{\beta}}} \quad (0.4)$$

ここで E_\parallel は水平電界である。

B.2.3 キャリア生成・再結合モデル

この項では、半導体におけるキャリアの生成や再結合を再現するモデルについて説明する。

単位時間あたりにキャリアが生成・再結合する濃度を表す再結合レート U (cm^{-3}/s) は以下の式によって求められる。

$$U = U_{\text{SRH}} + U_{\text{SUR}} + U_{\text{AUGER}} + U_{\text{IMPACT}} \quad (0.5)$$

Shockley-Read-Hall モデルは結晶欠陥やドーピングによって生じた禁制帯中の準位である再結合中心を介してキャリアが再結合する現象を再現するものである[28]. 以下にモデル式を示す.

$$U_{\text{SRH}} = \frac{n_i^2 - pn}{\tau_p(n + n_i) + \tau_n(p + n_i)} \quad (0.6)$$

$$\tau_{n,p} = A_{n,p} \left[\tau_{\text{min}}^{n,p} + \frac{\tau_{\text{max}}^{n,p} - \tau_{\text{min}}^{n,p}}{1 + (N/N_t^{n,p})^{B_{n,p}}} \right]$$

ここで n_i は真性キャリア濃度, n と p はそれぞれ電子/正孔濃度, N は不純物濃度である.

表面再結合モデルは半導体結晶の表面において生じる再結合中心を介してキャリアが再結合する現象を再現するモデルである[26]. 以下にモデル式を示す.

$$U_{\text{SUR}} = \frac{n_i^2 - pn}{(n + n_i)/s_p + (p + n_i)/s_n} \quad (0.7)$$

ここでモデルパラメータである s_p , s_n はSiと同じ値を想定した.

Auger 再結合モデルは, 電子と正孔の再結合のエネルギーを他の電子に与えて高エネルギーの電子が生ずる現象を再現するモデルである[29]. 以下にモデル式を示す.

$$U_{\text{AUG}} = -(n_i^2 - pn)(c_n n + c_p p) \quad (0.8)$$

インパクトイオン化モデルは電解によって加速された電子が結晶格子と衝突することにより, 電子と正孔を発生させる現象を再現するモデルである[30]. 以下にモデル式を示す.

$$U_{\text{IMPACT}} = \frac{1}{q} (\alpha_n |J_n| + \alpha_p |J_p|) \quad (0.9)$$

$$\alpha_{n,p} = \alpha_{n,p0} \exp \left[\frac{E_{n,p0}}{\frac{|J_{n,p} \cdot \mathbf{E}|}{|J_{n,p}|}} \right]$$

ここで q は電気素量, $J_{n,p}$ は電子・正孔電流ベクトル, \mathbf{E} は電場ベクトルである.

Table 16. Model parameters for SiC device simulation.

パラメータ	値	単位	Ref
密度	3.21e-3	Kg/cm ³	
バンドギャップ	3.26	eV	[31]
比誘電率	9.7		[31]
N0	1.0e17	/cm ³	
電子親和力	3.2	eV	[32]
V1	1.5e-2	V	
C	0.5		
伝導帯の有効電子密度 Nc	1.83e19	/cm ³	
常温での電子移動度 $\mu_{0,n}$	950	cm ² /Vs	[33]
電子移動度の格子温度依存係数 α_n	2.40		[34]
電子移動度の不純物濃度依存係数 $\mu_{min,n}$	40	cm ² /Vs	[33]
電子移動度の不純物濃度依存係数 $N_{0,n}$	2.0e17	/cm ³	[33]
電子移動度の不純物濃度依存係数 γ_n	0.76		[33]
価電子帯の有効電子密度 Nv	1.86e19	/cm ³	
常温での正孔移動度 $\mu_{0,p}$	125	cm ² /Vs	[34]
正孔移動度の格子温度依存係数 α_p	2.15		[34]
電子移動度の不純物濃度依存係数 $\mu_{min,p}$	15.9	cm ² /Vs	[34]
正孔移動度の不純物濃度依存係数 $N_{0,p}$	1.76e19	/cm ³	[34]
正孔移動度の不純物濃度依存係数 γ_p	0.34		[34]
電子移動度のフォノン散乱係数 B_n	1.0e6		[35]
電子移動度のフォノン散乱係数 c_{1n}	3.23e6		[36]
電子移動度のフォノン散乱係数 c_{2n}	0.0284		[36]
電子移動度のフォノン散乱係数 c_{3n}	0.333		[37]
電子移動度のラフネス散乱係数 c_{4n}	2.0		[37]
電子移動度のラフネス散乱係数 δ_n	5.82e14		[37]
電子移動度の水平電界依存性 β_n	1.2		[38]
電子の飽和速度 $V_{sat,n}$	2.2e7	cm/s	[38]
正孔移動度の水平電界依存性 β_p	1		[39]
正孔の飽和速度 $V_{sat0,p}$	2.2e7	cm/s	
電子のライフタイムの係数 τ_{max}^n	2e-5	s	
電子のライフタイムの係数 τ_{min}^n	1.0e-7	s	
電子のライフタイムの係数 N_t^n	3.0e17	/cm ³	[40]
電子のライフタイムの係数 A_n	1.0		[40]

電子のライフタイムの係数 B_n	0.3		[40]
正孔のライフタイムの係数 τ_{max}^p	4e-6	s	
正孔のライフタイムの係数 τ_{min}^p	1.0e-7	s	
正孔のライフタイムの係数 N_t^p	3e17	/cm ³	[40]
正孔のライフタイムの係数 A_p	1.0		[40]
正孔のライフタイムの係数 B_p	0.3		[40]
電子の再結合速度 S_n	100	/s	
正孔の再結合速度 S_p	100	/s	
電子の係数 C_n	5.0E-31	cm ⁻⁶ /s	[41]
正孔の係数 C_p	2.0E-31	cm ⁻⁶ /s	[41]
電子の電界依存係数 a_{n0}	0.46e6	/cm	[42]
電子の電界依存係数 E_{n0}	-1.78e7	V/cm	[42]
正孔の電界依存係数 a_{p0}	1.56e7	/cm	[42]
正孔の電界依存係数 E_{p0}	-1.72e7	V/cm	[42]

B.3 解析モデル

解析モデルを示す。モデルは二次元モデルであり、算出される電流値はデバイスの奥行き方向長さおよびユニットの数によって補正する必要がある。境界は対称境界となっている。モデルのゲート長さ、ソース長さ、ドーピング位置やその濃度などのパラメータの基準は Fig 8, Fig 9, Fig 10 を参考に Table 17 のように決定した。Fig 61 に解析モデルのゲートソース近傍を、Fig 62 に MOS 近傍のメッシュを示す。電流密度や電圧の勾配の大きくなるチャンネル部や MOS 付近のメッシュを細かくして解析の精度や収束性を向上する。物理モデルによる解析値と実験結果を比較することにより、妥当な結果が得られるモデルを探索する。また不純物濃度などは仮定や予想に基づくものであり、正確な値は不明であるためよりよく実験を再現する値を解析的に求めていくものとする。

Table 17. Device Simulation model Condition.

ゲート長さ	1.835 μm
ゲート厚さ	0.37 μm
基板長さ	4.53 μm
基板厚さ	170 μm
ゲート酸化膜厚さ	0.05 μm
チャンネルエピ層厚さ	0.05 μm
ソース長さ	1.67 μm
N+層ドーピング濃度	1.0E+20/cm ³
N+層厚さ	0.6 μm
P層ドーピング濃度	2.0E+17/cm ³
P層厚さ	0.4 μm
基板ドーピング濃度	1.0E+17/cm ³

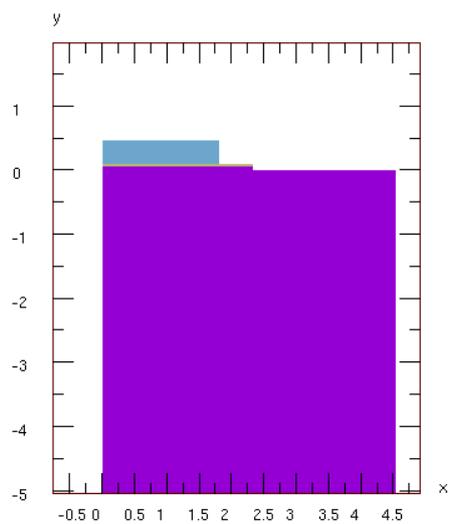


Fig 61. Device simulation model of SiC MOSFET.

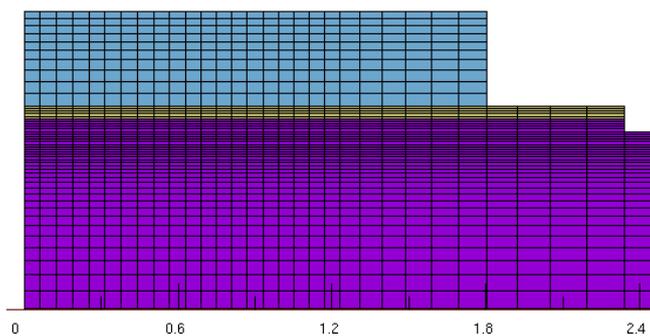


Fig 62. Mesh of the MOS.

参考文献

- [1] 松波弘之, 大谷昇, 木本恒暢, 中村孝, *半導体 SiC 技術と応用*. 日刊工業新聞社, 2013.
- [2] H. Miura and A. Nishimura, “パッケージング応力起因の半導体素子特性変動,” *日本機械学会論文集 A 編*, vol. 61.589, pp. 1957–1964, 1995.
- [3] K. Kosaka, “分光学的手法を用いた SiC パワーデバイスの物理解析,” no. 113, pp. 27–31, 2011.
- [4] M. Koganemaru, “絶縁ゲート型電界効果トランジスタの実装応力に起因する DC 特性変動評価,” 2008.
- [5] D. W. Feldman, J. H. Parker, W. J. Choyke, and L. Patrick, “Phonon Dispersion Curves by Raman Scattering in SiC, Polytypes 3C, 4H, 6H, 15R, and 21R,” *Phys. Rev.*, vol. 173, no. 3, 1968.
- [6] S. Nakashima and H. Hariam, “Raman Investigation of SiC polytypes,” *Phys. status solidi*, vol. 162, no. 1, pp. 39–64, 1997.
- [7] R. Sugie, T. Uchida, K. Kosaka, and R. Endoh, “ラマン分光法を用いた SiC パワー素子の応力の温度依存性計測,” *NANOTS*, pp. 47–52, 2014.
- [8] R. J. Briggs and a. K. Ramdas, “Piezospectroscopic study of the raman spectrum of cadmium sulfide,” *Phys. Rev. B*, vol. 13, no. 12, pp. 5518–5529, 1976.
- [9] T. Ito, H. Azuma, and S. Noda, “Stress Analysis in Micro Areas of LSIs Using Raman Microprobe,” vol. 29, no. 4, 1994.
- [10] CREE, *CPM2-1200-0025B Silicon Carbide Power MOSFET Data Sheets*. .
- [11] H. Harima, “Raman scattering characterization on SiC,” *Microelectron. Eng.*, vol. 83, no. 1 SPEC. ISS., pp. 126–129, 2006.
- [12] E. Biedermann, “The optical absorption bands and their anisotropy in various modifications of SiC,” *Solid State Commun.*, vol. 3, no. 10, pp. 343–346, 1965.

- [13] H. Harima, “極浅イオン注入 Si 層の紫外ラマン観察,” pp. 133–136, 2008.
- [14] H. J. Monkhorst and J. D. Pack, “Special points for Brillouin-zone integrations,” *Phys. Rev. B*, vol. 13, no. 12, pp. 5188–5192, 1976.
- [15] K. Kamitani, M. Grimsditch, J. C. Nipko, C.-K. Loong, M. Okada, and I. Kimura, “The elastic constants of silicon carbide: A Brillouin-scattering study of 4H and 6H SiC single crystals,” *J. Appl. Phys.*, vol. 82, no. 6, p. 3152, 1997.
- [16] D. Olego, M. Cardona, and P. Vogl, “Pressure dependence of the optical phonons and transverse effective charge in 3 C-SiC,” *Phys. Rev. B*, vol. 25, no. 6, p. 3878, 1982.
- [17] M. J. Liu, “Simple technique for measurements of pulsed Gaussian-beam spot sizes,” *Opt. Lett.*, vol. 7, no. 5, pp. 196–198, 1982.
- [18] 泉聡志 and 酒井信介, 実践有限要素法シミュレーション. 2013.
- [19] Z. Li and R. C. Bradt, “Thermal expansion and thermal expansion anisotropy of SiC polytypes,” *J. Am. Ceram. Soc.*, vol. 70, no. 7, 1987.
- [20] L. B. Freund and S. Suresh, “Thin film materials,” *Thin Film Materials*. pp. 94–96, 2003.
- [21] 日本機械学会, 伝熱工学資料. 2009.
- [22] K. A. K. Saito, “Interface Properties of Y, Cu, Ni Thin Films/SiC Contacts By Electrical Measurements,” 秋田高専研究紀要, vol. 45, pp. 64–72, 2010.
- [23] 島津ひろみ and 三浦英生, “ニッケルシリサイド薄膜形成過程における応力発生メカニズムの検討,” 日本機械学会, vol. 64, no. 618, p. 327, 1998.
- [24] M. Yamagiwa, Q. Yu, M. Fujita, M. Shinohara, and Y. Murakami, “Reliability Study of High-Temperature-Resistant Mounting Structure Using High Purity Aluminum for Power Devices CTE : Co- (FEM : Finite Ele- I-6,” vol. 12, no. 3, pp. 238–247, 2009.
- [25] L. a. Navarro, X. Perpiñà, M. Vellvehi, V. Banu, and X. Jordà, “Thermal cycling analysis of high temperature die-attach materials,” *Microelectron. Reliab.*, vol. 52, no. 9–10, pp. 2314–2320, 2012.

- [26] S. M. Sze and K. N. Kwok, *Physics of Semiconductor Devices*, vol. 16, no. 1, 2007.
- [27] G. Masetti, M. Severi, and S. Solmi, “Modeling of carrier mobility against carrier concentration in arsenic-, phosphorus-, and boron-doped silicon,” *Electron Devices, IEEE Trans.*, vol. 30, no. 7, pp. 764–769, 1983.
- [28] W. Shockley and W. T. Read, “Statistics of the Recombination of Holes and Electrons,” *Phys. Rev.*, vol. 87, no. 46, pp. 835–842, 1952.
- [29] S.K.Ghandhi, *Semiconductor Power Devices*. 1977.
- [30] T. Rang, “One-dimensional numerical simulation of complementary power Schottky structures IN — I,” vol. 132, no. 6, pp. 253–256, 1985.
- [31] S. Takashi, “SiC Power Devices,” pp. 49–53.
- [32] S. Y. Davydov, “On the electron affinity of silicon carbide polytypes,” *Semiconductors*, vol. 41, no. 6, pp. 696–698, 2007.
- [33] M. Roschke and F. Schwierz, “Electron mobility models for 4H, 6H, and 3C SiC,” *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 48, no. 7, pp. 1442–1447, 2001.
- [34] T. Ayalew, “SiC Semiconductor Devices Technology, Modeling, and Simulation.” 2004.
- [35] H. Linewih, “Design and Application of SiC Power MOSFET,” *Thesis*, no. October, 2002.
- [36] a. Pérez-Tomás, P. Brosselard, P. Godignon, J. Millán, N. Mestres, M. R. Jennings, J. a. Covington, and P. a. Mawby, “Field-effect mobility temperature modeling of 4H-SiC metal-oxide- semiconductor transistors,” *J. Appl. Phys.*, vol. 100, no. 11, pp. 1–6, 2006.
- [37] H. Linewih, S. Dimitrijević, and K. Y. Cheong, “Channel-carrier mobility parameters for 4H SiC MOSFETs,” *Microelectron. Reliab.*, vol. 43, no. 3, pp. 405–411, 2003.
- [38] I. a. Khan and J. a. Cooper, “Measurement of High Field Electron Transport in Silicon Carbide,” *Mater. Sci. Forum*, vol. 264–268, no. 2, pp. 509–512, 1998.
- [39] J. Wang and B. W. Williams, “The 4H-SiC npn power bipolar junction transistor,” *Semicond. Sci. Technol.*, vol. 14, no. 12, pp. 1088–1097, 1999.

- [40] M. Ruff, H. Mitlehner, and R. Helbig, “SiC devices: Physics and numerical simulation,” *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 41, no. 6, pp. 1040–1054, 1994.
- [41] a. Galeckas, J. Linnros, V. Grivickas, U. Lindefelt, and C. Hallin, “Auger recombination in 4H-SiC: Unusual temperature behavior,” *Appl. Phys. Lett.*, vol. 71, no. 22, p. 3269, 1997.
- [42] A. Akturk, N. Goldsman, S. Aslam, J. Sigwarth, and F. Herrero, “Comparison of 4H-SiC impact ionization models using experiments and self-consistent simulations,” *J. Appl. Phys.*, vol. 104, no. 2, pp. 13–16, 2008.

謝辞

本研究は、筆者が東京大学大学院工学系研究科機械工学専攻在学中、酒井信介教授のご指導のもと行ったものです。

指導教員の酒井信介教授には研究会や試問などで鋭いご指摘をいただくたびに、自分の視野の狭さを実感いたしました。より広い知識と視野を持てるよう、今後も学び続けたいと思います。また信頼性について伺ったお話は今後の仕事の上で必ず直面する問題であり、その前に知見を広げることができたことを感謝しております。

泉聡志教授には研究の方針について細かく相談に乗っていただき、研究をすすめる上で大変参考になりました。また有限要素法解析についてだけでなく雑談ひとつとっても泉教授のお話は非常に興味深く、教授にお教えいただいた技術やシミュレーションにおける心構えなどは今後働く上でもかならず役に立つものであると確信しております。大変感謝しております。

株式会社東芝の廣畑様、牛流様、松澤様には四点曲げ実験の実施のほか、デバイスシミュレーションの実施方法、実験やデバイス構造についての質問に頻繁にお答えいただき大変お世話になりました。修士1年の頃から長い間お世話になり、私の不勉強から大変ご迷惑をお掛けしたことと思います。頻繁に研究室にお越しいただき、半導体の基本的な知識からお教えいただきました。心より感謝しております。

波田野明日可助教は、教授のお二方よりもより学生に近い立場から研究の相談に乗って下さったほか、普段から頻繁に学生のことをお気遣いくださり、研究だけでなく心持的にも助けていただきました。深謝いたします。

昨年転属された原祥太郎准教授と田中展助教には、特に学部4年次などは研究の相談に乗っていただいたり、雑談に付き合っていたりするなどお世話になりました。感謝申し上げます。

酒井泉研究室は信頼性や有限要素法、材料力学について研究し学ぶ上で素晴らしい環境であり、ここで3年間研究や学業、研究室行事などに励むことができたことに大変感謝しております。

博士課程の高本さんには大変お世話になりました。学生でありながら研究室のほとんどの研究について把握し精通しているところには恐れいりました。研究では第一原理計算ソフトの計算環境を整備して使用法の説明をしてくださったり、計算機の調整をしてくださったり、研究の上でわからない点についての質問に頻繁にお答えいただいたり、行き詰まった時に助言をいただいたり、先生方よりもより身近な立場で相談に乗っていただいたりと、大変お世話になりました。もちろん研究以外でも普段の機知に富んだお話は大変興味深く、来年度から聞けなくなると思うと名残惜しい気持ちでいっぱいです。ネットの海で拝見できることを期待しております。

同期の皆様には研究でも研究以外でも大変お世話になりました。皆と良好な関係を築くことができた研究室生活でとても満足しています。

吉村君は隣の席で研究についての細々した相談に頻繁に乗ってもらったほか、提出物の締切日などを教えてもらったり、旅行の時に駅から一緒に行ってもらったりするなどとてもお世話になりました。また同期旅行で私の実家を訪れた後も博多とおりもんを送ってくれて両親も喜んでいました。ふとした時の細かい気配りは感心します。連れて行ってくれた日本シリーズ最終戦はとても楽しかったです。

中田君は3年間生活のサイクルを一切崩さずに研究に励んでいるところや、オンとオフの切り替えがうまいところを是非これから見習っていこうと思います。また一眼を持っている私よりもカメラの撮影センスが光っていて感服しました。エレクトーンコンサートを聞きに行くことができず残念に思っています。録音や録画などあれば是非聞かせて欲しいです。

舘君はイベント係として研究室のものに限らず旅行を企画してくれてとても楽しい研究室生活をおくることができました。B4 の時から同期で旅行に行き親睦を深めることができたのは舘君がイベントを企画してくれたおかげだと思います。学祭でまるきゅうの公演を頻繁に見に来てくれたことも嬉しかったです。マラバリのパフォーマーとして技術や自分の見え方を研究し、研鑽した結果としてのパフォーマンスはとても格好よかったです。

橋本君は修論シーズンに定期的に話し相手になってくれて気分的にとっても楽になりました。また私が ANSYS の使い方で困っている時に教えてくれた時も助かりました。あらゆるソフトに精通した FEM 解析マスターになれるように頑張ってください。修論でとても忙しい時期に並行して卒業旅行の企画もほとんど全部推し進めてくれたのはありがたかったです。卒業旅行とても楽しかったです。

植田君はその広い守備範囲から私のどんな発言も拾ってくれて嬉しかったです。来年度以降も近辺に知り合いがいると思うと心強いです。たまに遊びや飲みにつき合ってくれれば嬉しいです。気軽に誘ってください。あと社会に出た後もお酒を飲む機会はたくさんあるかと思いますが、植田君のお酒で潰れない姿勢と次の日に残さないところを是非見習っていきたいと思います。

M1の後輩の皆様は研究室を個性的なキャラクターで盛り上げてくれてとても楽しい二年間でした。榎間君はとても真面目で、二年間とも関連した研究に携わりましたが研究会で質問を積極的に投げってくれたり研究分野についての数少ない相談相手となってくれたりとても助かりました。研究の合間には島本君の絵に癒やされていました。島本君の動物っぽい絵が好きです。またネットなどで見られることを楽しみにしています。またふとした時の細やかな心配りに感心しました。住吉谷君は主に修士一年次に共同研究の打ち合わせ議事録をいつも取ってくれて助かりました。一見まともそうに見えて意味のわからないキャラクターはとても魅力的で、研究室の雰囲気を柔らかくするのに一役買っていました。今泉君はイベント係お疲れ様です。修士二年次の研究室旅行や親睦会楽しかったです。鳥人間の話聞くのはとても興味深かったです。また頻繁に雑談相手になってくれて嬉しかったです。世古口君の歴史や地理の話を振っても常に会話をリードしていけるような引き出しの多さは感服しますし退屈することがありませんでした。中嶋君は卒業後も頻繁に研究室に遊びに来てくれて会えて嬉しかったです。中嶋君に会うという目的があったおかげで研究室に通うことができた部分もあります。朝倉君は自分のやりたい音楽をちゃんと表現しているのが格好よく、またとても羨ましかったです。今も聞きながら書いています。

B4の後輩の皆様も個性的なキャラクターでM2の一年間退屈しない研究室生活を送らせてもらえました。これからも自分らしさを失わずに仕事や学業に励んでください。

そして私を支えてくれた家族や友人たちにも心から感謝申し上げます。簡単ではありますが、感謝の気持ちとお礼を申し上げたく、謝辞にかえさせていただきます。

以上

P.1~P.101 完

修論論文

東京大学大学院 工学系研究科 機械工学専攻

37-146235 村上陽一

指導教員 酒井 信介 教授