

修士論文

4H-SiC パワーデバイスの応力および
転位動力学解析技術の開発

平成 29 年 2 月提出

指導教員 泉聡志 教授

37-156201 榊間大輝

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 4H-SiC パワーデバイス.....	8
1.1.2 パワーデバイスの応力評価.....	9
1.1.3 バイポーラデバイス作動時の転位すべり挙動.....	10
1.2 研究目的.....	11
1.3 本論文の構成.....	11
第 2 章 フォノン変形ポテンシャル係数の算出.....	13
2.1 緒言.....	13
2.2 ラマン分光法.....	13
2.2.1 ラマン分光測定.....	13
2.2.2 ラマン分光法による応力評価.....	15
2.3 フォノン変形ポテンシャル係数の算出.....	16
2.3.1 第一原理計算.....	16
2.3.2 計算条件.....	18
2.4 解析結果.....	19
2.4.1 弾性定数の算出.....	19
2.4.2 無応力状態.....	20
2.4.3 一軸応力によるフォノン変形ポテンシャル係数の算出.....	21
2.4.4 せん断応力.....	25
2.4.5 2 軸等方応力.....	29
2.4.6 三軸等方応力.....	33
2.5 妥当性の確認, 考察.....	35
2.5.1 静水圧での実験との比較.....	35
2.5.2 四点曲げ実験との比較.....	35
2.5.3 シミュレーション結果と理論式の比較.....	36
2.6 結言.....	37
第 3 章 有限要素法によるデバイスの残留応力評価.....	38
3.1 緒言.....	38
3.2 4H-SiC MOSFET の構造.....	38
3.3 応力分布のラマンシフトへの変換.....	40

3.4	解析条件.....	42
3.4.1	構造, 主な条件	42
3.4.2	材料定数.....	43
1)	SiO ₂ のヤング率, 線膨張係数の決定	43
2)	その他の材料定数.....	48
3.5	多段階熱応力解析, 真性応力の考慮.....	49
3.5.1	多段階熱応力解析	49
3.5.2	真性応力の考慮, 検討.....	51
1)	ドーピングで生じる真性応力 [4]	51
2)	エピタキシャル成長起因応力	51
3)	シリサイド化による応力 [4]	51
4)	ポリシリコンの構造変化に伴う応力	52
5)	SiN 起因応力.....	52
3.6	解析結果.....	52
3.6.1	垂直応力	52
3.6.2	せん断応力	56
3.6.3	ラマンシフトの分布	57
3.7	結言	60
第 4 章	転位動力学解析に基づく積層欠陥形状の再現	61
4.1	緒言	61
4.2	4H-SiC 中の転位	61
4.2.1	エピタキシャル成長と基底面転位	61
4.2.2	基底面転位の分裂.....	62
4.3	再結合促進転位すべり (REDG)	63
4.3.1	順方向劣化と積層欠陥.....	63
4.3.2	積層欠陥エネルギーに基づく移動モデル	64
4.4	本研究の位置づけ, 目的.....	65
4.5	転位動力学.....	65
4.5.1	転位に作用する力	66
4.5.2	外力.....	66
4.5.3	転位間相互作用, 自己張力	66
4.5.4	転位位置更新法	67
1)	応力と転位速度の関係.....	67
2)	REDG による効果.....	69
4.5.5	解析条件.....	70
4.6	三角欠陥への適用.....	71

4.6.1	エピ層中の基底面転位と三角欠陥	71
4.6.2	転位動力学計算結果	71
4.6.3	分裂の種類の影響	74
4.7	BPD-TED 変換点への適用	75
4.7.1	BPD-TED 変換点と積層欠陥	75
4.7.2	両端を固定された短い素片による積層欠陥形成	75
4.7.3	実験との比較	79
4.8	結言	81
第 5 章	結言	82
参考文献		83
謝辞		88

圖一覽

Fig. 1. Stacking structure of SiC polytypes [1]	9
Fig. 2. Flowchart of this research.....	12
Fig. 3. Mechanism of Raman scattering.....	14
Fig. 4. Phonon dispersion curves of 4H-SiC [7]	15
Fig. 5. 4H-SiC Raman spectrum[7].....	15
Fig. 6. 4H-SiC layered structure [4].....	17
Fig. 7. 4H-SiC unit cell [4].....	17
Fig. 8. Procedure for First-principles calculation of vibration modes.....	18
Fig. 9 . Calculated Raman shift and fitted theoretical formula under uniaxial stress σ_x	22
Fig. 10. Calculated Raman shift and fitted theoretical formula under uniaxial stress σ_y	23
Fig. 11. Calculated Raman shift and fitted theoretical formula under uniaxial stress σ_z	24
Fig. 12. Calculated Raman shift and fitted theoretical formula under uniaxial stress τ_{xy}	26
Fig. 13. Calculated Raman shift and fitted theoretical formula under uniaxial stress τ_{yz}	27
Fig. 14. Calculated Raman shift and fitted theoretical formula under uniaxial stress τ_{zx}	28
Fig. 15. Calculated Raman shift and fitted theoretical formula under biaxial isotropic stress σ on xy plane	30
Fig. 16. Calculated Raman shift and fitted theoretical formula under biaxial isotropic stress σ on yz plane	31
Fig. 17. Calculated Raman shift and fitted theoretical formula under biaxial isotropic stress σ on zx plane	32
Fig. 18. Calculated Raman shift and fitted theoretical formula under triaxial stress	34
Fig. 19. Average angles between direction of A1 mode vibration and z axis under shear stress τ_{xy}	37
Fig. 20. Electron micrography of MOSFET [4].....	39
Fig. 21. Diagram of SiC MOSFET [4].....	39
Fig. 22. Position of sampling points in laser spot	40
Fig. 23. Normalized intensity distribution of laser beam spot	40
Fig. 24. FE model of MOSFET	42
Fig. 25. Top view and boundary conditions	43
Fig. 26. Temperature dependence (a) curvature and (b) internal stress.....	46
Fig. 27. Temperature dependence (a) curvature and (b) internal stress.....	47
Fig. 28. Thermal expansion coefficient of SiC [19].....	48
Fig. 29. Thermal expansion coefficient of Al [21].....	48
Fig. 30. Thermal expansion coefficient of SiN and polySi [20].....	49

Fig. 31. Process flow of SiC MOSFET [4]	50
Fig. 32. Distribution of σ_x of each analysis step.....	53
Fig. 33. Distribution of σ_y at each analysis step	54
Fig. 34. Distribution of σ_z at each analysis step	55
Fig. 35. Distribution of shear stress.....	56
Fig. 36. Measurement area of Raman frequency shift.....	57
Fig. 37. Raman shift distribution (cal) calculation (exp) experiments	59
Fig. 38. Conversion from BPD to TD	62
Fig. 39. Dissociation of perfect dislocation in 4H-SiC	63
Fig. 40. Expansion of stacking fault.....	63
Fig. 41. Activation energy depending on angle between dislocation and burgers vector ...	69
Fig. 42. Relative dislocation velocity depending on the angle	70
Fig. 43. Growth of triangle stacking fault from BPD in epitaxial layer	71
Fig. 44. Simulation result without REDG effect	72
Fig. 45. Simulation result with REDG effect	73
Fig. 46. Stacking fault expansion from BPD in epitaxial layer.....	74
Fig. 47. Expansion of rectangular stacking fault.....	74
Fig. 48. Stacking fault expansion from BPD portion	78
Fig. 49. Observed shape and proposed model of stacking fault expansion [47]	79
Fig. 50. Initial state of Dislocaiton	80
Fig. 51 Expansion shapes of stacking fault	80

表一覽

Table 1. Physical properties of major semiconductor materials [1]	8
Table 2. Physical properties of SiC polytypes [1]	9
Table 3. Raman frequencies of 4H-SiC (cm^{-1}) [7] [8]	14
Table 4. Conditions for first-principles calculation	19
Table 5. Stress conditions of calculation.	19
Table 6. Elastic coefficients of 4H-SiC.	20
Table 7. Analysis results of 4H-SiC phonon mode.	20
Table 8. Analysis condition	43
Table 9. Result of nanoindentation test	44
Table 10. Condition of warpage measurement	45
Table 11. Elastic coefficient of materials	48
Table 12. Formation temperature of materials.	50
Table 13. Activation Energy of Dislocation motion [43]	68
Table 14. Activation energy used in simulation	68
Table 15. Condition of calculation	71

第1章 序論

1.1 研究背景

1.1.1 4H-SiC パワーデバイス

従来電力用半導体デバイス(パワーデバイス)にはシリコン(Si)半導体が用いられてきたが、Si を用いたパワーデバイスの性能は Si の物性的な限界に近づきつつある。そこで近年、絶縁破壊強度、電子飽和速度、熱伝導率などの物理特性が Si に比べ優れている炭化ケイ素(SiC)が次世代半導体材料として注目されている。Table1 に主な半導体材料の物性値を示す。SiC や GaN 等のワイドギャップ半導体は禁制帯幅が広いこと Si 等に比べ高温でのリーク電流を抑えることが可能であり、また絶縁破壊強度が大きいことから高電圧で動作が可能となる。これらの特徴により、SiC を用いたパワーデバイスは高耐電圧、高温動作、高速動作、低損失といった特性を得られるため、Si を用いた従来のシステムに比べシステムの簡略化や省エネルギー化が達成可能であり、次世代パワーデバイスとして研究開発が盛んに行われている。SiC を使用したインバータが鉄道車両に導入されるなど、実用化も進んでいる。

Table 1. Physical properties of major semiconductor materials [1]

	4H-SiC	Si	GaAs	GaN	ダイヤモンド
バンドギャップ(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

SiC は IV 族の原子である Si と C からなる半導体であり、結晶は 4 頂点に Si もしくは C 原子を、中央に頂点とは異なる原子を配置した正四面体構造を積み重ねた構造になっている。この積み重ね方の違いにより、SiC は 200 種以上の結晶多形が確認されている。Fig. 1 に代表的な結晶多形である 3C-, 4H-, 6H-の積層構造の模式図を、Table 2 にそれぞれの物理特性を示す。Fig. 1 における縦方向が積層方向であり、六方晶における c 軸方向となる。3C-SiC は立方晶であり等方材料であるのに対し、4H-, 6H-SiC は六方晶であるため弾性的性質などに異方性を有している。電子移動度、禁制帯幅や絶縁破壊強度が大きい、良質な単結晶ウェーハが入手できるなどの点から、結晶多形の中で

は 4H-SiC がパワーデバイスとして最も適していると考えられている．本研究においても 4H-SiC を研究対象とする．

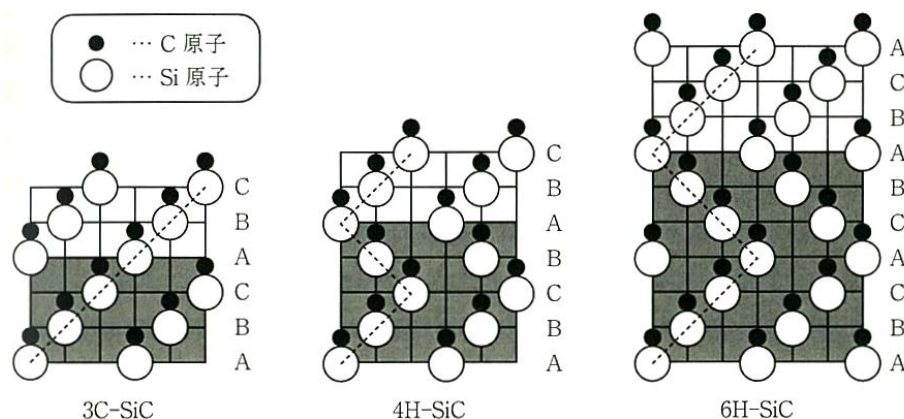


Fig. 1. Stacking structure of SiC polytypes [1]

Table 2. Physical properties of SiC polytypes [1]

	3C-SiC	4H-SiC	6H-SiC
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 軸方向) 1200(c 軸垂直方向)	450(c 軸方向) 100(c 軸垂直方向)
正孔移動度(cm ² /Vs)	50	120	100
絶縁破壊強度(MV/cm)	1.5	2.8	3.0

1.1.2 パワーデバイスの応力評価

4H-SiC を用いたパワーデバイスの作成時，SiC や Si 以外にも Ni, Al といった金属材料が使用される．それぞれの実装温度も異なるため，材料毎の線膨張係数の違いにより発生する熱応力が作成後のデバイスに生じる．また，ウェーハ，エピタキシャル成長層間の転位密度の差やデバイス作成過程におけるイオンのドーピング，酸化でも原子サイズの差や結晶構造の不整合により真性応力と呼ばれる応力が生じる．そのため，作成後の SiC デバイスには複雑な応力分布が生じている．また，高温動作が想定されるパワーデバイスでは，その作動温度によっても応力分布に変化が生じる．Si を使用したデバイスにおいて応力分布が電気特性や信頼性に影響を与えることが知られており，SiC 使用デバイスにおいても応力が電気特性に影響を与え耐電圧や寿命の低下，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ため，デバイスに生じる応力分布の評価手法を確立することは信頼性を確保する上での重要な課題の 1 つとなっている．

作成されたデバイスの内部応力分布を測定する方法に、ラマン分光法による散乱光の振動数変化の測定がある。本手法はレーザー光を入射した時に測定されるラマン散乱光の振動数が応力により生じるひずみに応じて変化することを利用した手法であるが、4H-SiC においてはこのラマンシフトと応力成分の関係に関する報告が少なく、先行研究においても Si や 3C-SiC での値を評価に用いる、応力を等方応力と仮定する等 [2]、定性的な評価に留まっているのが現状である。六方晶においてラマンシフトと応力成分を結び付ける関係式は Briggs らによる理論導出により与えられている [3]が、定量的な評価を行うためには、未知パラメータであるフォノン変形ポテンシャル係数を算出する必要がある。また、デバイスを作成する毎にラマン分光測定を行うことは現実的ではないため、解析によって応力分布を求める手法が必要となる。これらの課題を解決するため、第一原理計算により 4H-SiC におけるフォノン変形ポテンシャルを算出し、有限要素法を用いた多段階熱応力解析により求めたデバイス内部の応力分布と組み合わせることにより、ラマン分光測定結果と比較可能な形でデバイスの応力評価を行う手法が村上により提案された [4]。しかしながら、村上の先行研究では実験と解析に一定の一致は見られたものの、解析で求められたラマンシフト-応力の関係と結晶構造に基づき求められた理論式に一致しない部分が見られる、有限要素解析によって得られたラマンシフトの分布とラマン分光測定結果に差異が見られる等、妥当性の確認までは実施されていない。そこで本研究では第一原理計算による係数の算出手法の再検討及び、各製造プロセスで生じる真性応力の検討により解析の高精度化を行い、実験と比較可能な形での応力解析手法の完成を目指す。

1.1.3 バイポーラデバイス作動時の転位すべり挙動

4H-SiC を使用したパワーデバイスの実用化は MOSFET やショットキーバリアダイオードといったユニポーラデバイスが中心であり、より高耐圧領域での利用が期待される pin ダイオード等のバイポーラデバイスでは実用化に至っていない。これはバイポーラデバイス作動時に、順方向特性が劣化し on 抵抗が増大する現象によるものである。本現象は電流注入時にデバイス中に存在する積層欠陥(Stacking Fault; SF) の端に存在する部分転位(Partial Dislocation; PD)がすべり運動を起こし、積層欠陥が拡大することか原因であることが明らかになっている [5]。本現象は部分転位のすべり運動が正孔と電子の再結合により励起されることから REDG(Recombination Enhanced Dislocation Glide)と呼ばれ、多くの研究者が現象の解明に取り組んでいる。しかしながら、その研究の多くは転位移動前後の観察に基づく現象論的なアプローチ、もしくは第一原理計算や古典分子動力学に基づく原子スケールでのアプローチに留まっており、転位の移動、形状変化を理論的に検証、予測する手法は提案されていないのが現状である。そこで本研究では転位の移動を弾性論に基づき予測する手法である転位動力学に REDG による転位の移動

のモデル [6] を組み合わせたシミュレータを開発することにより、REDG 時の転位移動を理論的に解析、予測する手法の開発を行う。

1.2 研究目的

上述の背景より、4H-SiC パワーデバイスの信頼性確保に資することを念頭に本論文では SiC パワーデバイス作成時に必要となる有限要素法を中心とした応力解析手法の開発、及びバイポーラデバイス通電時の順方向劣化現象の解明、抑制のために必要となる転位動力学解析手法の開発の2点を目的とする。

本研究では、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の算出、有限要素法によるデバイス内部の残留応力評価を行い、これらとラマン分光測定を組み合わせることにより、実験との比較検証による妥当性確認までを含んだ定量的な応力評価手法の開発に取り組む。また、REDG による移動モデル、パイエルスポテンシャルの影響により生じる転位の配向性を組み込んだ移動モデルを開発し転位動力学シミュレーションに組み込むことにより、低温の4H-SiC に発生するREDG による転位移動を再現可能なシミュレーションを開発する。

1.3 本論文の構成

本論文は、本章を含めて全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、応力-ラマンシフト関係式の基礎理論について説明し、本研究で行った第一原理計算によるフォノン変形ポテンシャル算出の手法、得られた結果、及びそれに対する考察を述べる。

第3章では、応力分布のラマンシフト分布への変換手法、有限要素法による多段階熱応力解析に基づいたSiC デバイスの残留応力解析手法について説明し、本研究でえられた応力解析結果を示す。得られた応力分布を第2章で算出したフォノン変形ポテンシャル係数に基づきラマンシフトへと変換し、ラマン測定実験との比較評価、得られた結果に対する考察を行う。

第4章では4H-SiC に発生する転位の性質、及びREDG 現象についての概説し、本研究で開発したREDG による移動を組み込んだ転位動力学シミュレータについての説明、再現した積層欠陥の形状を基に理論と実験結果の検証、考察を行う。

第5章では本研究の結論と今後の展望を述べる。

本研究の構成を Fig. 2 に示す。

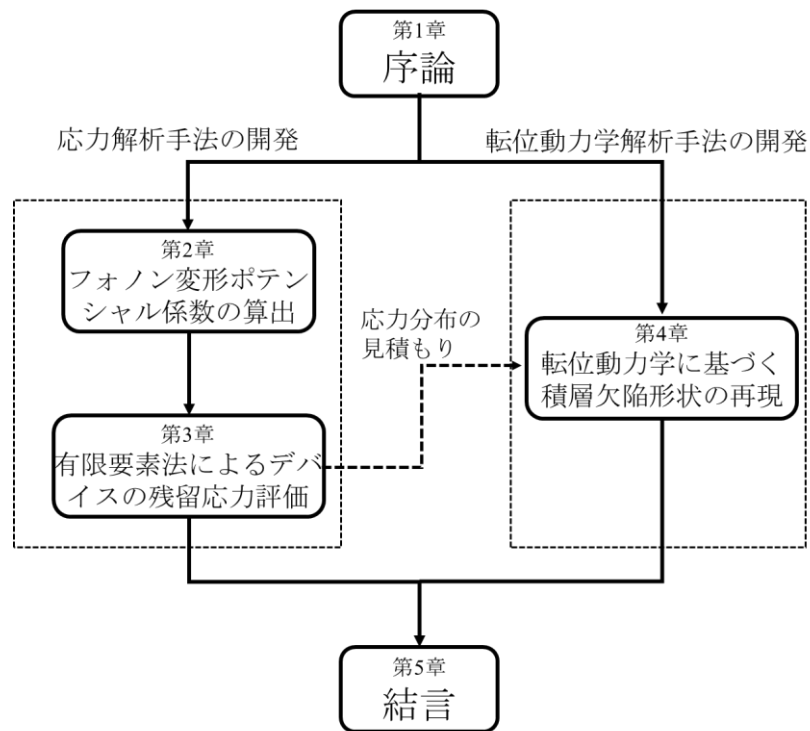


Fig. 2. Flowchart of this research

第2章 フォノン変形ポテンシャル係数の算出

2.1 緒言

SiC デバイスの内部応力を解析的に求める手法を確立するためには実験結果との比較検証が重要となる．半導体の応力分布評価に広く用いられているラマン分光法では得られるラマンシフトを応力分布へと変換することにより応力評価を行うが，両者を定量的に結び付けるには未知の値であるフォノン変形ポテンシャル係数を求める必要がある．本章ではまず応力分布の実験的な評価手法であるラマン分光法，応力ーラマンシフト関係式の基礎理論について説明し，次に本研究で行った第一原理計算によるフォノン変形ポテンシャル算出手法，得られた結果，及びそれに対する考察を述べる．

2.2 ラマン分光法

2.2.1 ラマン分光測定

デバイス内部の応力評価に用いられるラマン分光法は物質に光を照射した際に生じるラマン散乱光を利用している．散乱により生じる光には，励起光と同じ波長である例リー散乱光と，励起光とは異なる波長であるラマン散乱がある．ラマン散乱光は格子振動によって生じるため励起光とラマン散乱光の振動数の差は結晶の振動数と一致する．Fig. 3 にラマン散乱のモデルを示す．ラマン散乱光には入射光より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，一般的にはより強度の大きいストークス散乱の測定を行う．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， $1\mu\text{m}$ 以下で測定が可能であるため，マイクロメートルオーダーの大きさである SiC デバイスの解析へ適用可能である．

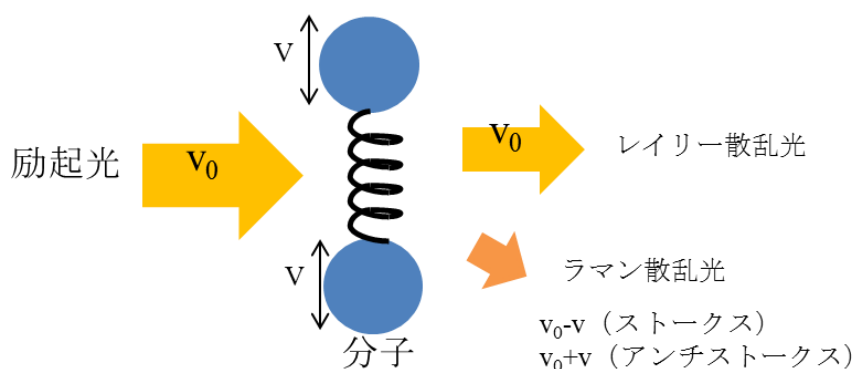


Fig. 3. Mechanism of Raman scattering

ラマン分光法では測定されるラマン散乱光とそのスペクトル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の配置関係により決定される．例えば， $Z(X,Y)\bar{Z}$ で表される散乱配置は Z 方向に進行する X 方向偏光の励起光を入射光に用いて $-Z$ 方向に進行する Y 方向偏光の散乱光を検出することを示す．Table 3 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 [7] [8], 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 [9]．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 3 において-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 に示すようなラマンスペクトルが計測される．A1, E1, E2, B1 という表現は結晶の基準振動モードを示しており，A1 モードは c 軸と平行な方向の振動に，E1, E2 モードは c 軸に垂直な平面内での振動に対応している．また，E1, E2 モードは無応力状態では 2 重に縮退している．

Table 3. Raman frequencies of 4H-SiC (cm^{-1}) [7] [8]

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

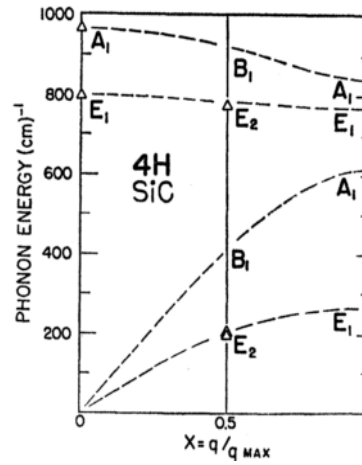


Fig. 4. Phonon dispersion curves of 4H-SiC [7]

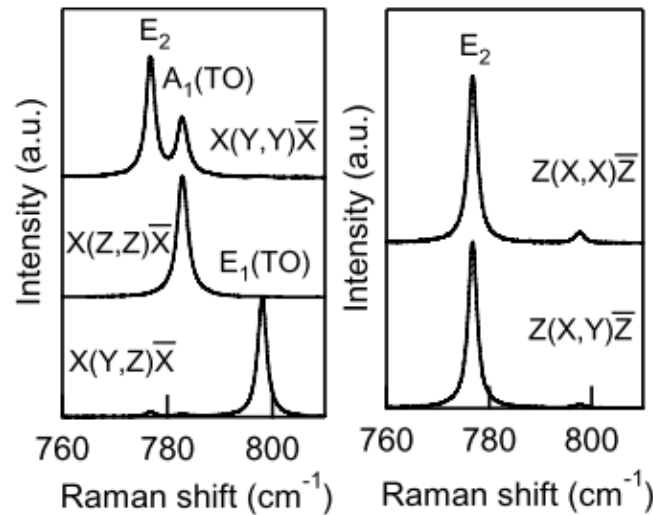


Fig. 5. 4H-SiC Raman spectrum[7]

2.2.2 ラマン分光法による応力評価

結晶に応力をかけるとひずみが生じ原子間距離が変化する。原子間の結合力は原子間距離の関数であるため、応力により原子間距離に変化が生じると結合力が変化し格子振動の振動数も変化する。これにより、応力の有無により観測されるラマンスペクトルにも変化が生じる。応力とラマンスペクトルの変化量(ラマンシフト)の関係が既知であれば、ラマンシフトを用いた応力の評価が可能となる。これがラマン分光法による応力評価の基礎原理である。一般に、ラマンスペクトルは圧縮応力では高波数側に、引張応力では低波数側にシフトするが、応力成分を含めた定量的な評価には材料の結晶構造や物

性値の考慮が必要となる．Briggs らによると 4H-SiC 結晶の属する C_{6v} 対称群では垂直応力 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 [3].

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

ここで， a_i, b_i, c_i ($i = A1, E1, E2$) は振動数変化と各応力成分を結び付ける係数でフォノン変形ポテンシャル係数と呼ばれる．4H-SiC について本係数を求めた報告はまだ少ないため，ラマン分光法を SiC デバイスに適用した先行研究では等方応力の仮定や，構造や性質が近いと考えられる 3C-SiC や Si の係数を使用して応力の評価を行っている [2] [9]．本研究ではこの係数の値を第一原理計算により求める．

2.3 フォノン変形ポテンシャル係数の算出

2.3.1 第一原理計算

本研究では応力の値にひずみを与えた結晶の振動モードを第一原理計算により求め，応力変化と振動数変化の関係を得ることによりフォノン変形ポテンシャル係数を求めた．第一原理計算には PHASE/0 [10]を用いた．PHASE/0 は NIMS で開発された電子状態計算プログラムで，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物質の未知の物性を求めることが可能である．本研究ではフォノンの振動モードの算出に PHASE/0 を使用している．

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. 6 に 4H-SiC の積層構造の模式図を，Fig. 7 にユニットセルのモデル図を示す．以下，表記の簡略化のため，Fig. 6 に示す通り $[2\bar{1}\bar{1}0]$ 方向を x 軸方向， $[0001]$ 方向を z 軸方向と表記する．Fig. 6 の赤い線で囲われた部分が Fig. 7 で示すユニットセルにあたる．六方晶である 4H-SiC のユニットセルは結晶対称性から六角形の 3 分の 1 にあたる平行六面体となり，本研究ではこのユニットセルに対して計算を行う．Fig. 7 における (a,b,c) はユニットセルの基本ベクトルである．本研究では解析パラメータとして (a,b,c) を変更することによって結晶にひずみを与え，応力，各振動モードの振動数を第一原理計算によって算出する．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．Fig. 8 にフォノンモードを求めるまでの計算手順を示す．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, E1,E2モードにおいて生じる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振動モードが求めることができる.

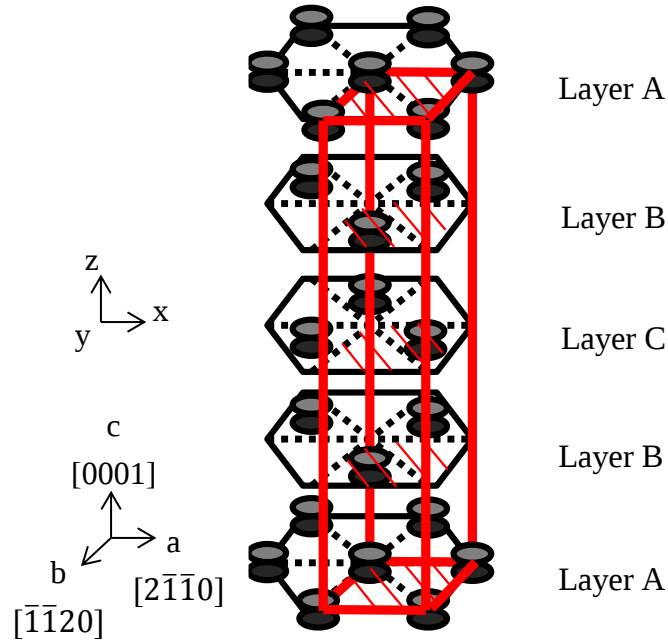


Fig. 6. 4H-SiC layered structure [4]

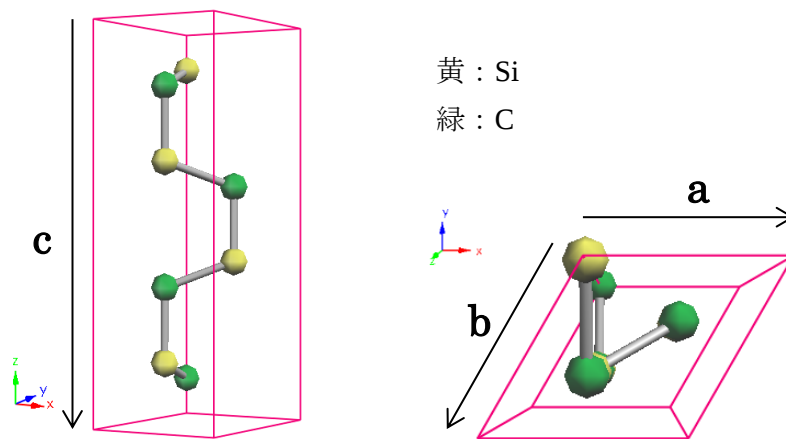


Fig. 7. 4H-SiC unit cell [4]

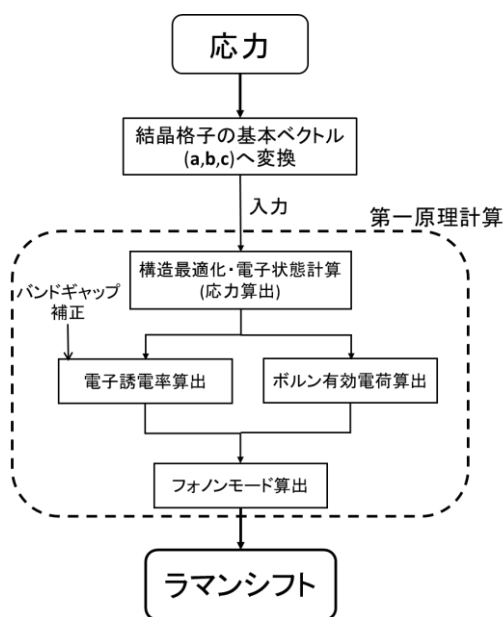


Fig. 8. Procedure for First-principles calculation of vibration modes

2.3.2 計算条件

Table 4 に主な計算条件を示す. 計算には密度汎関数法を, K 点のサンプリングには Monkhorst-Pack 法を用いる. 本研究では, 先行研究 [4]で考慮されていなかった結晶構造のひずみにより生じる原子位置の緩和を加え, 構造緩和に対する収束条件をより厳しくすることにより計算の高精度化を図った. また, パワーデバイスに生じる残留応力は大きくても数百 MPa 程度であるため, 計算を行う応力範囲も 1GPa 以下とした. Table 5 に計算に使用した応力条件を示す.

2.3.1 節で述べたように第一原理計算では入力パラメータとして結晶のひずみを使用し, 応力とラマンシフトの関係もひずみを介して与えられるため, 計算における弾性定数の正確性が重要となる. そこで本研究ではまず弾性定数を算出し計算の妥当性の確認を行った. 弾性定数の算出は各成分に 0.01%のひずみをかけた構造の応力成分をひずみの大きさに割ることにより行った. ここで得られた弾性定数はフォノン変形ポテンシャル係数算出時に, 入力する応力条件をひずみ成分に変換するための係数として使用している.

次に $\pm 100, 500, 1000$ MPa の一軸応力をかけた結晶について解析を行い, 各モードの振動数を算出した. 得られたラマンシフトと応力の関係を直線近似することによりフォノン変形ポテンシャル係数の算出を行った. 最後に, 純粋せん断応力, 2 軸等方応力, 3 軸等方応力のかく状態について応力とラマンシフトの関係を算出し, 得られた係数を用いた理論式との比較を行うことで妥当性の確認を行った.

Table 4. Conditions for first-principles calculation

計算手法	密度関数法・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)
計算バシット数	20
K点分割数	12×12×4
K点サンプリング法	Monkhorst-Pack 法
バンドギャップ基準値	3.26eV

Table 5. Stress conditions of calculation.

応力条件	方向	応力値(MPa)
一軸応力	X	±100, 500, 1000
	Y	
	Z	
せん断応力	xz	
	yz	
	xy	

2.4 解析結果

2.4.1 弾性定数の算出

六方晶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．六方晶における c 軸方向を z 方向としている．

$$\begin{bmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} \\ \sigma_{xy} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ & c_{11} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ & & c_{33} & 0 & 0 & 0 \\ & & & c_{44} & 0 & 0 \\ sym & & & & c_{44} & 0 \\ & & & & & (c_{11} - c_{12})/2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_x \\ \varepsilon_y \\ \varepsilon_z \\ 2\varepsilon_{yz} \\ 2\varepsilon_{zx} \\ 2\varepsilon_{xy} \end{bmatrix} \quad (2.2)$$

Fig. 7 に本研究の第一原理計算によって求められた弾性定数 c_{ij} を対応する実験結果と共に示す．実験値との差は最も大きい c_{33} で約 5%である．第一原理計算は応力テンソルに対しては収束性が悪いため、この差を生み出している原因としては構造緩和時の収束計算が不十分であることが考えられるが、数百 MPa 程度の応力条件ではラマンシフト

に与える影響は高々 0.05cm^{-1} 程度であるため、本計算においてひずみ-応力の関係が与える誤差はラマンシフトに関する結果には大きな影響は与えないと考えられる。

Table 6. Elastic coefficients of 4H-SiC.

c_{ij}	弾性定数(GPa)	
	実験値 [11]	計算値
c_{11}	507 ± 4	523.6
c_{33}	547 ± 4	575.1
c_{44}	159 ± 7	167.1
c_{12}	108 ± 5	113.1
c_{13}	52 ± 9	51.0

2.4.2 無応力状態

Table 7 に基準となる無応力状態における各モードの振動数を示す。モードと波数ベクトルは振動のベクトルから決定した。ラマン分光測定により計測されたモードは 780cm^{-1} 付近の E2(2/4)ラマン線と A1(0)ラマン線、 800cm^{-1} 付近の E1(0)ラマン線である。したがって、本研究では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 7 において太字で示した、E2(2/4)モードの 780.1cm^{-1} の 2 つ、A1(0)モードの 783.6cm^{-1} のモード、E1(0)モードの 799.1cm^{-1} の 2 つの計 5 モードを使用する。これらの値は 3.6.3 節で説明する本研究で用いるラマン分光測定と同一の散乱配置 $Z(X, X+Y)\bar{Z}$ で観測された結果 [12]と $\pm 4\text{cm}^{-1}$ 以内で一致している。2 重に縮退しているモードを区別するため、以下これらのモードを便宜的に A1,E1-1,E1-2,E2-1,E2-1 モードと表す。ラマンシフトが正となる場合に、(2.1)式において 3 項目の符号が正であるものを E1-1,E2-1、符号が負であるものを E1-2,E2-2 とする。

Table 7. Analysis results of 4H-SiC phonon mode.

モード	A1	B1	E1	E2
振動数(cm^{-1})	608.0 (4/4)	400.9 (2/4)	261.3 (4/4)	193.3 (2/4)
	783.6 (0)	409.0 (2/4)	261.3 (4/4)	193.3 (2/4)
かつこの中は Fig.	843.0 (4/4)	915.8 (2/4)	771.8 (4/4)	201.3 (2/4)
4 の波数ベクトル x		925.0 (2/4)	771.8 (4/4)	201.3 (2/4)
			799.1 (0)	780.1 (2/4)
			799.1 (0)	780.1 (2/4)
				788.0 (2/4)
				788.0 (2/4)

2.4.3 一軸応力によるフォノン変形ポテンシャル係数の算出

本節では x 軸, y 軸, z 軸の各方向に対して一軸応力をかけた場合の応力とラマンシフトの関係, 及びこれらの結果より得られたフォノン変形ポテンシャル係数を示す.

応力-ラマンシフトの変換式(2.1)は, 一軸応力の条件下では以下の式(2.3),(2.4)のように表現される. 本研究では, 一軸応力をかけた構造の応力-ラマンシフトの傾きを式(2.3),(2.4)に代入することにより各係数を求めた. x 軸方向, y 軸方向については各軸方向の傾きの平均値を用いた.

$$\begin{aligned}
 &\text{x 軸方向} & \Delta\omega_{A1} &= a_{A1}\sigma_{xx} \\
 &(\text{y 軸方向も同様}) & \Delta\omega_{E1} &= (a_{E1} \pm c_{E1})\sigma_{xx} \\
 & & \Delta\omega_{E2} &= (a_{E2} \pm c_{E2})\sigma_{xx} \\
 &\text{z 軸方向} & \Delta\omega_{A1} &= b_{A1}\sigma_{zz} \\
 & & \Delta\omega_{E1} &= b_{E1}\sigma_{zz} \\
 & & \Delta\omega_{E2} &= b_{E2}\sigma_{zz}
 \end{aligned} \tag{2.3}$$

$$\tag{2.4}$$

Fig. 9 に x 軸方向の, Fig. 10 に y 軸方向の, Fig. 11 に z 軸方向の応力とラマンシフトの関係を示す. 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. これらの結果の線形近似によって得られた傾きを式(2.3), (2.4)に当てはめることにより変換係数を求めた. 以下に算出された係数を用いた関係式を示す. 比較のため, この式で得られる結果についても Fig. 9, Fig. 10, Fig. 11 に破線で示す.

$$\begin{aligned}
 \Delta\omega_{A1} &= -0.69(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) - 2.55\sigma_{zz} \\
 \Delta\omega_{E1} &= -1.65(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) - 0.63\sigma_{zz} \\
 &\quad \pm 0.54 [(\sigma_{xx} - \sigma_{yy})^2 + 4\tau_{xy}^2]^{1/2} \\
 \Delta\omega_{E2} &= -1.68(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) - 0.78\sigma_{zz} \\
 &\quad \pm 0.51 [(\sigma_{xx} - \sigma_{yy})^2 + 4\tau_{xy}^2]^{1/2}
 \end{aligned} \tag{2.5}$$

一軸応力でのシミュレーション結果と式(2.5)で与えられる関係は, 低応力の状態では良い一致を見せている. 一方, σ_{xx}, σ_{yy} に対する A1 モードの変化について応力値の高い状態では最大 7%程度の差異が見られた. 以降の節では, 純粋せん断応力, 2 軸等方応力, 3 軸等方応力の各条件についてシミュレーション結果と式(2.5)で与えられる関係

(以降, 理論式と呼ぶ) の比較を行うことにより, 算出した理論式の妥当性を確認するとともに, 前述した差異の原因に関する考察を行う.

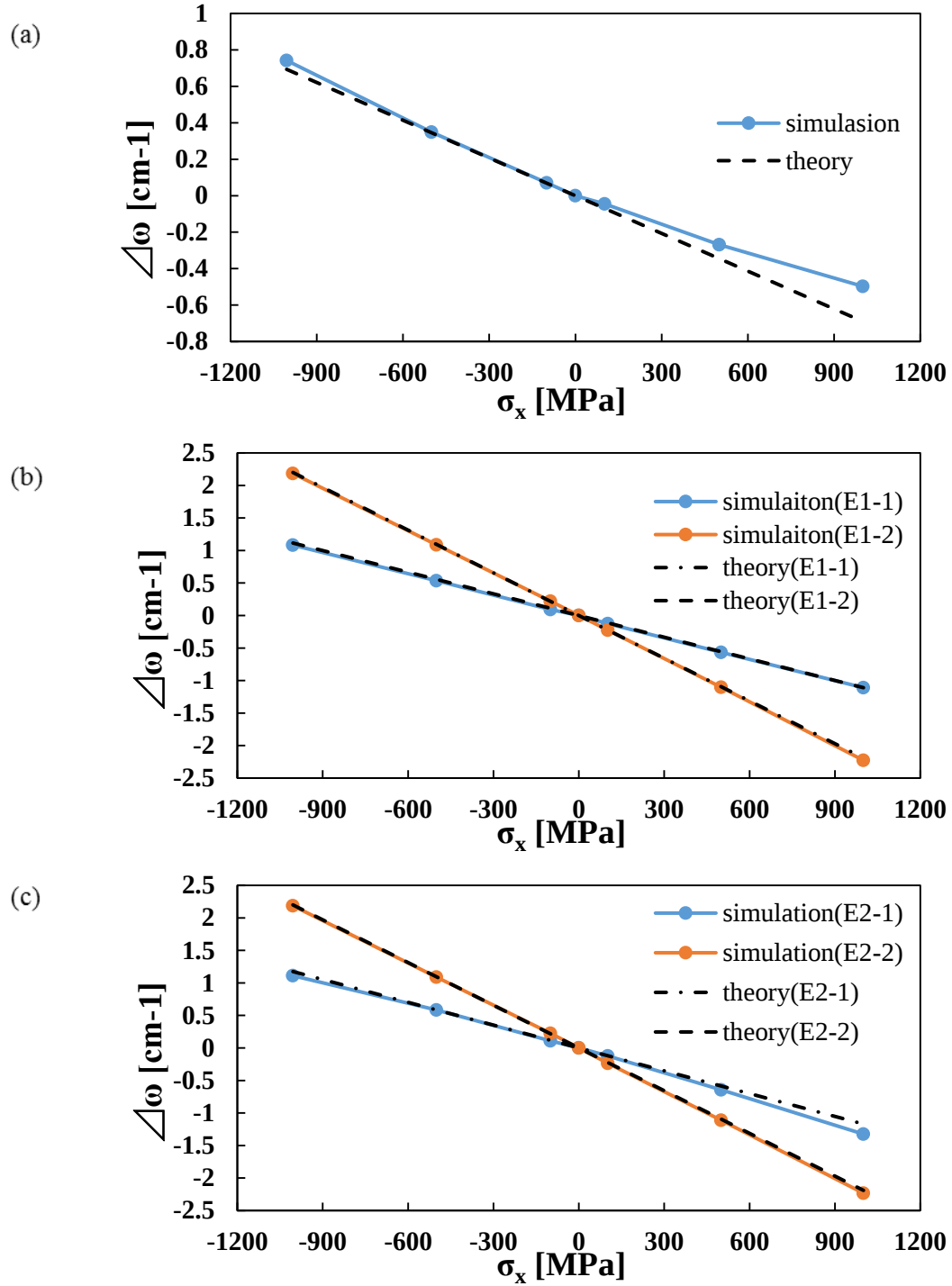
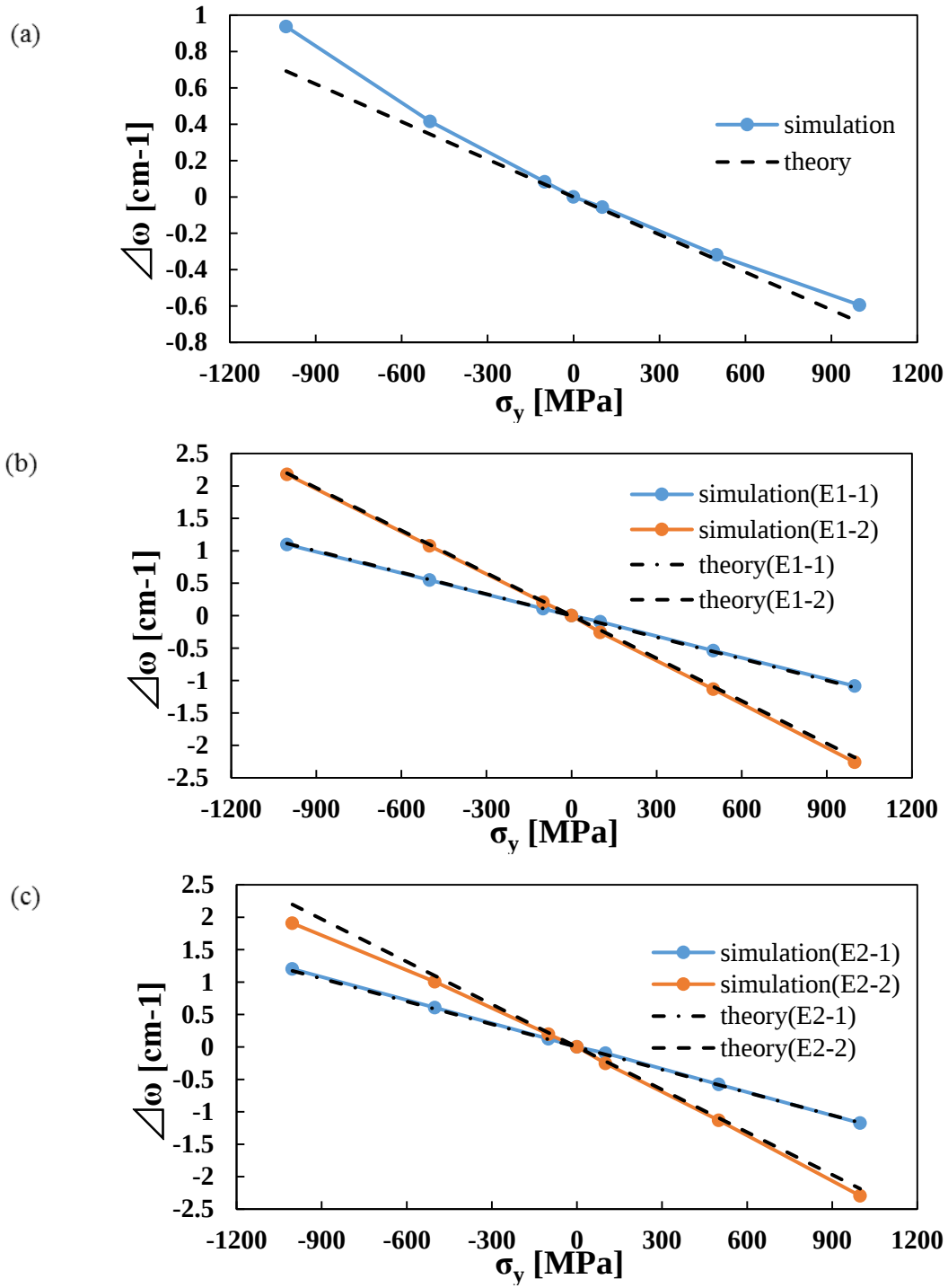


Fig. 9 . Calculated Raman shift and fitted theoretical formula under uniaxial stress σ_x
(a)A1 mode (b)E1 mode (c)E2 mode

Fig. 10. Calculated Raman shift and fitted theoretical formula under uniaxial stress σ_y

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

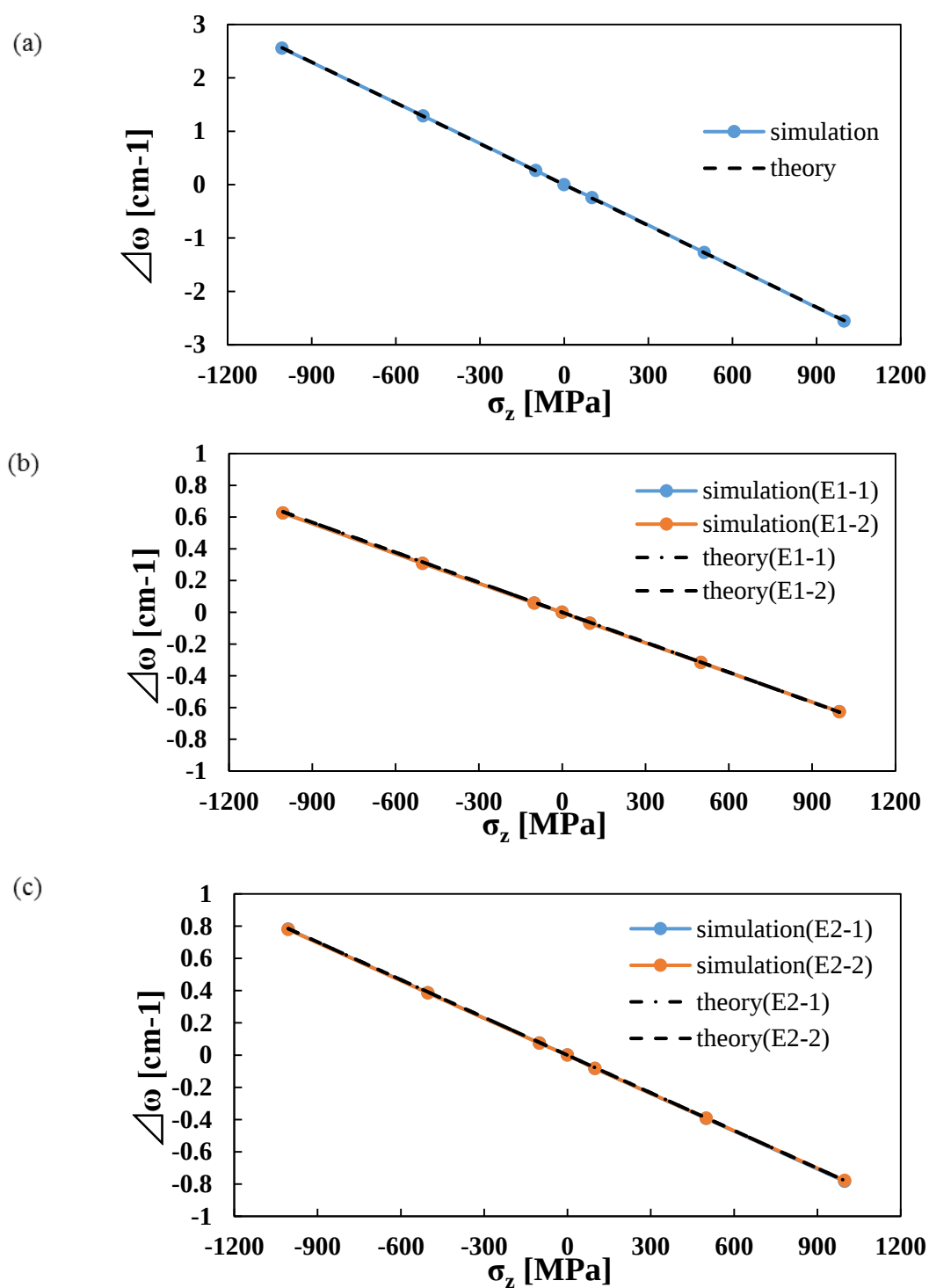


Fig. 11. Calculated Raman shift and fitted theoretical formula under uniaxial stress σ_z
 (a)A1 mode (b)E1 mode (c)E2 mode

2.4.4 せん断応力

Briggs の式に基づくと、せん断応力の影響は τ_{xy} と E1,E2 モードの間に限られ、他の成分はラマンシフトに影響を与えないと考えられる。本節では、 $\tau_{xy}, \tau_{yz}, \tau_{zx}$ の各成分のみの純粋せん断における、応力とラマンシフトの関係について得られた結果を示す。

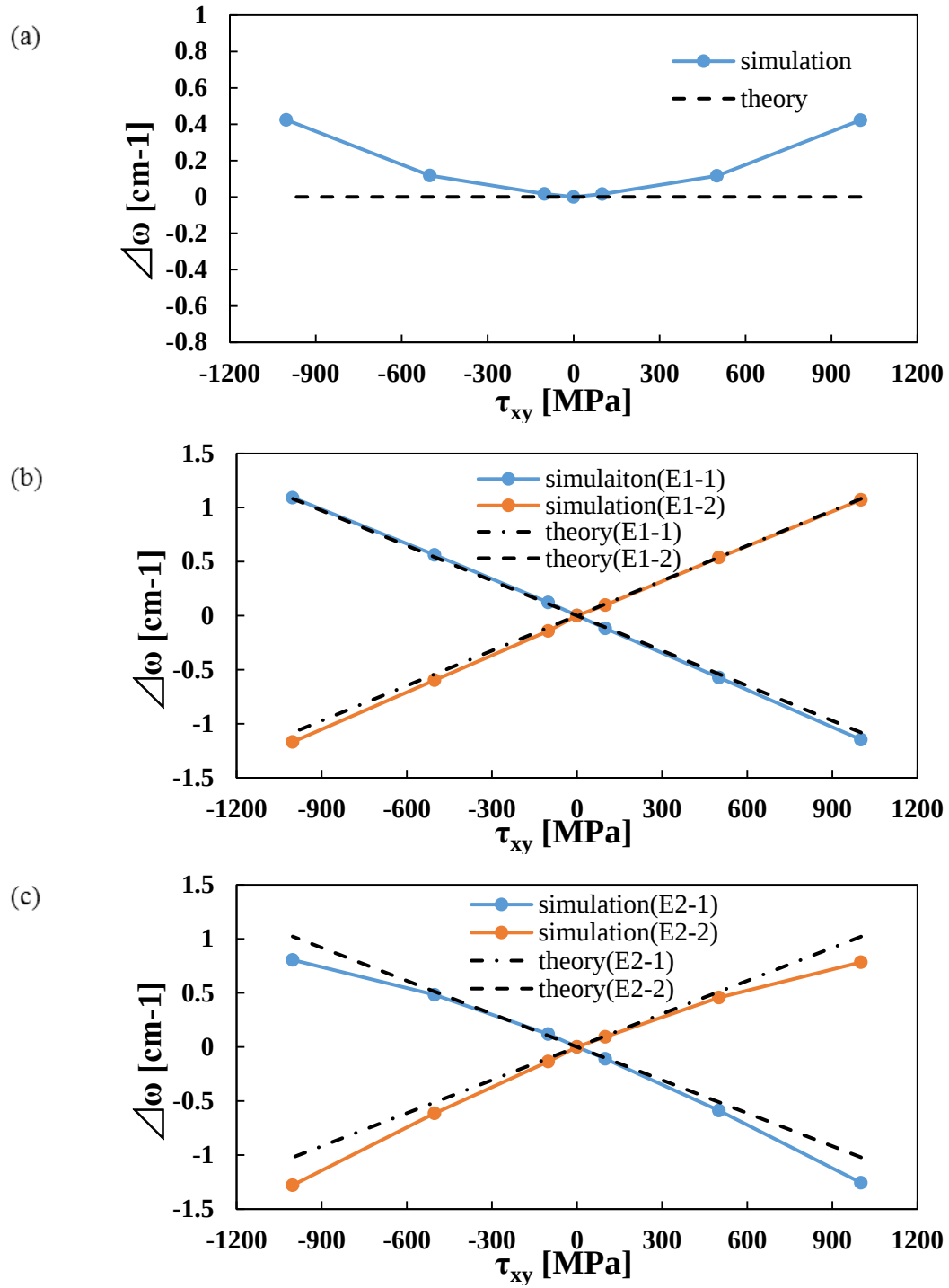
純粋せん断の条件下では、応力-ラマンシフト変換式は 2.4.3 項で得られた結果を用いると次のように表現される。

$$\begin{aligned} \text{xy 方向} \quad \Delta\omega_{A1} &= 0 \\ \Delta\omega_{E1} &= \pm 1.08 \tau_{xy} \end{aligned} \tag{2.6}$$

$$\Delta\omega_{E2} = \pm 1.02 \tau_{xy}$$

$$\text{yz,zx 方向} \quad \Delta\omega_{A1} = \Delta\omega_{E1} = \Delta\omega_{E2} = 0 \tag{2.7}$$

Fig. 12, Fig. 13, Fig. 14 にそれぞれ xy, yz, zx 方向のせん断応力について応力とラマンシフトの関係を示す。シミュレーション結果と理論式を比較するため、一軸応力の場合と同様式(2.6)(2.7)についても Fig. 12, Fig. 13, Fig. 14 に破線で示す。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。応力値が低い状態では理論式とシミュレーション結果が一致することが確認された。一方、大きい応力がかかる場合には一軸応力の場合と同様 τ_{xy} と A1 モードの間や τ_{yz}, τ_{zx} 全般など、本来ラマンシフトには影響しないはずの状態においても変化が見られ理論式との乖離が見られた。この乖離の度合いが一軸応力の場合に比べ大きいことから、せん断応力がシミュレーション結果と理論式の差異を生み出す要因に関わっていると考えられる。

Fig. 12. Calculated Raman shift and fitted theoretical formula under uniaxial stress τ_{xy}

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

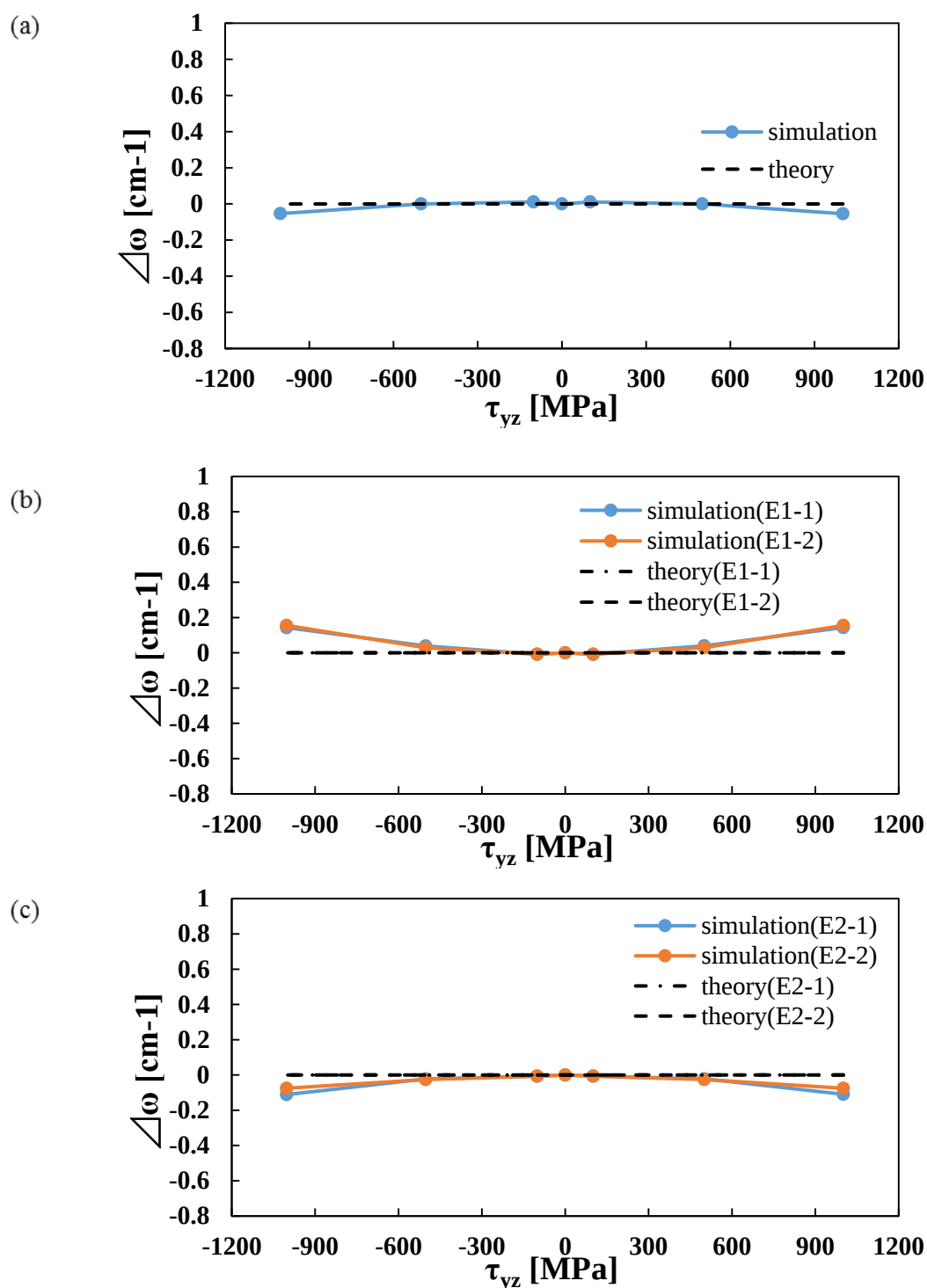
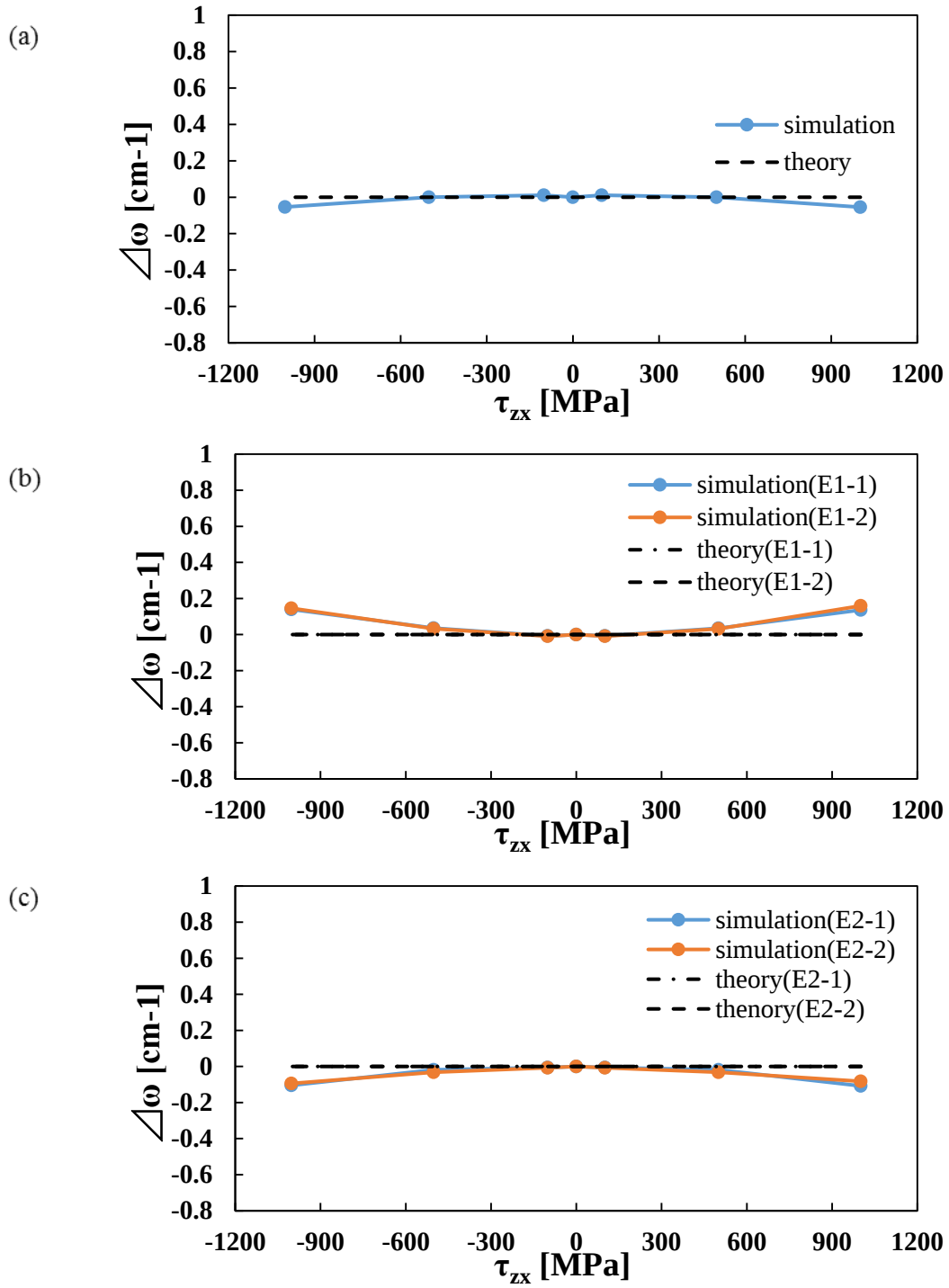


Fig. 13. Calculated Raman shift and fitted theoretical formula under uniaxial stress τ_{yz}
 (a)A1 mode (b)E1 mode (c)E2 mode

Fig. 14. Calculated Raman shift and fitted theoretical formula under uniaxial stress τ_{zx}

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

2.4.5 2 軸等方応力

本項では, xy , yz , zx の各面について 2 軸等方応力をかけた場合の応力, ラマンシフトの関係について得られた結果を示す.

2 軸等方応力の条件下では, 応力-ラマンシフト変換式は 2.4.3 項で得られた結果を用いると次のように表現される. 各軸方向での応力値を σ [GPa] と表す. 引っ張りを正とする.

$$\begin{aligned} xy \text{ 方向} \quad \Delta\omega_{A1} &= -1.38\sigma \\ \Delta\omega_{E1} &= -3.30\sigma \end{aligned} \tag{2.8}$$

$$\Delta\omega_{E2} = -3.36\sigma$$

$$\begin{aligned} yz, zx \text{ 方向} \quad \Delta\omega_{A1} &= -3.24\sigma \\ \Delta\omega_{E1} &= -(2.28 \pm 0.54)\sigma \end{aligned} \tag{2.9}$$

$$\Delta\omega_{E2} = -(2.46 \pm 0.51)\sigma$$

Fig. 15 に xy 方向について, Fig. 16 に yz 方向について, Fig. 17 に zx 方向についてそれぞれ 2 軸等方応力とラマンシフトの関係を示す. yz , zx 方向の 2 軸応力と A1 モードの関係等において応力が大きい場合に理論式とシミュレーション結果において差が見られる部分が存在したがその差は最大 7% 程度に留まっており, その他のモード, 応力成分については理論式とシミュレーション結果ではとても良い一致が見られた. 理論式とシミュレーション結果に差異が生じた原因については, せん断応力成分の影響があると考えている. yz, zx 平面方向に 2 軸等方応力を付加した場合, xy 平面上では 1 軸応力と同等の状態が生じる. その為, 一軸応力の条件における σ_{xx}, σ_{yy} に対する A1 モードの変化について応力が大きい場合にシミュレーションと理論式の値に差が生まれたのと同様の現象が生じていると考えることができる. 一方, xy 平面上での 2 軸等方引張では応力が大きい場合にもシミュレーション結果と理論式の間に差異は生じなかった. 一軸応力と 2 軸等方応力の大きな違いは応力場せん断応力成分の有無である.

これらの結果より, 一軸応力, 純粋せん断応力, そして yz , zx 方向に対する 2 軸等方応力の条件下で見られたシミュレーション結果と理論式の差異は, xy 平面におけるせん断応力成分の有無やその大きさにより決まると考えられる.

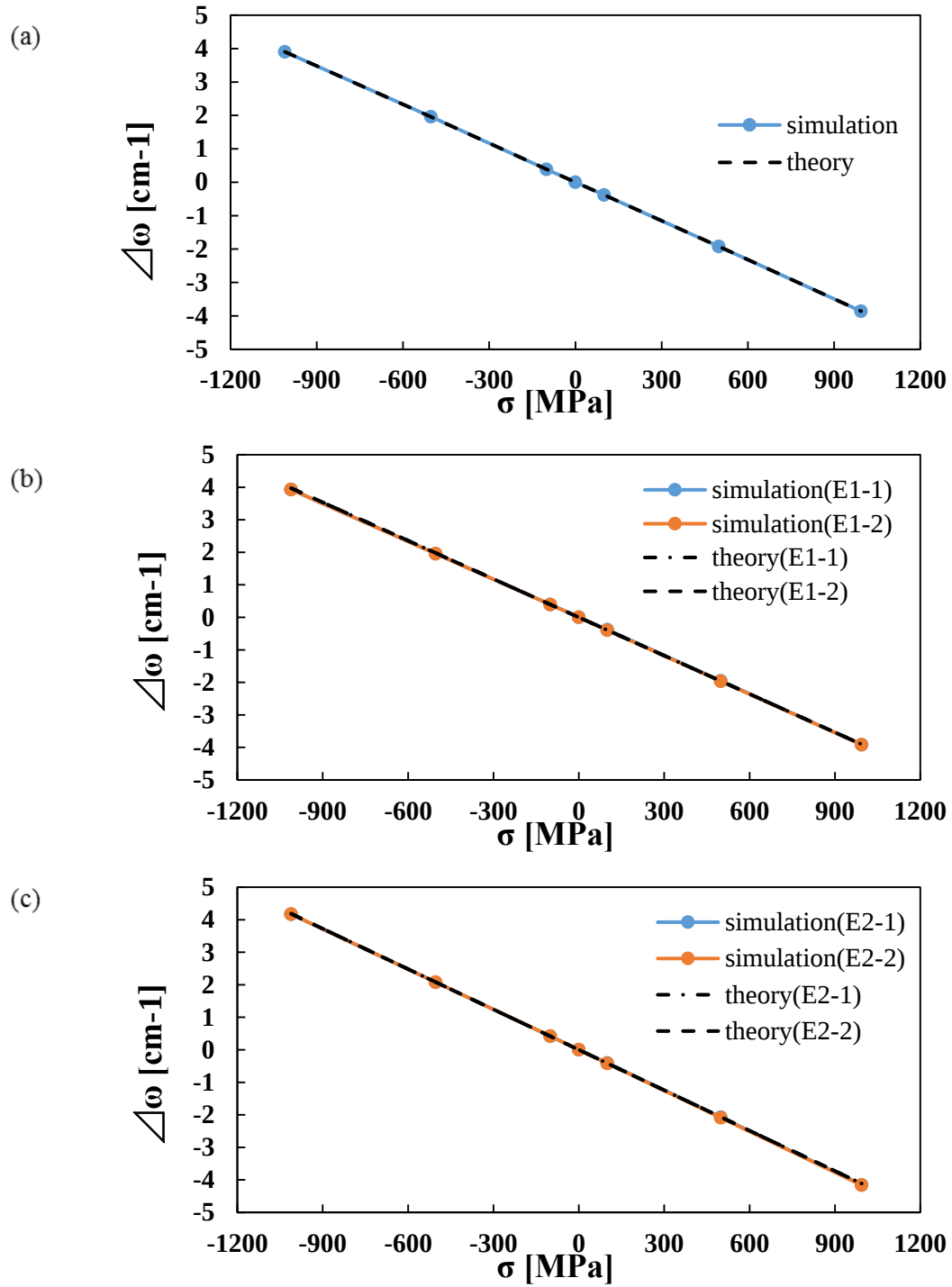


Fig. 15. Calculated Raman shift and fitted theoretical formula under biaxial isotropic stress σ on xy plane (a)A1 mode (b)E1 mode (c)E2 mode

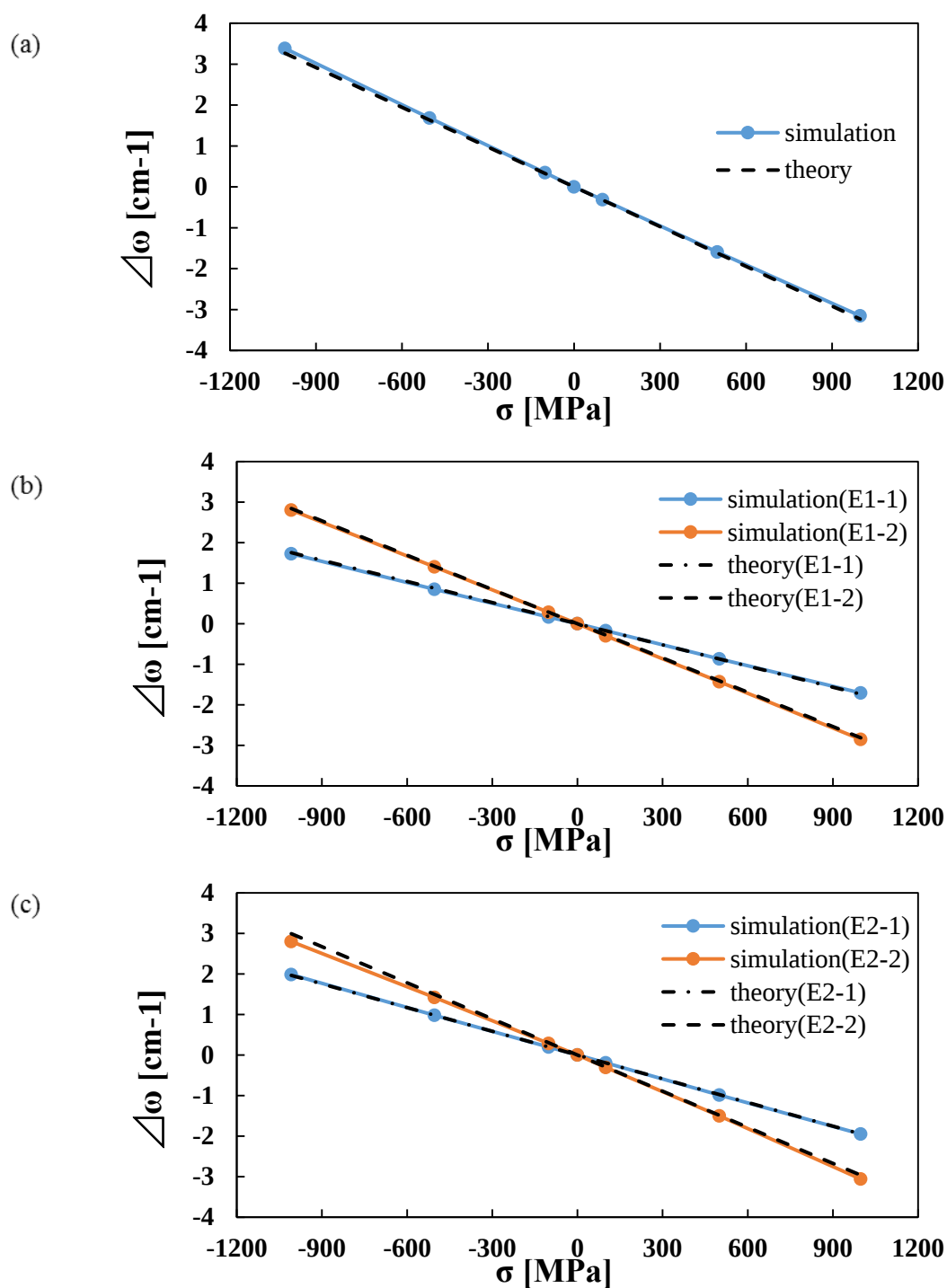


Fig. 16. Calculated Raman shift and fitted theoretical formula under biaxial isotropic stress σ on yz plane (a)A1 mode (b)E1 mode (c)E2 mode

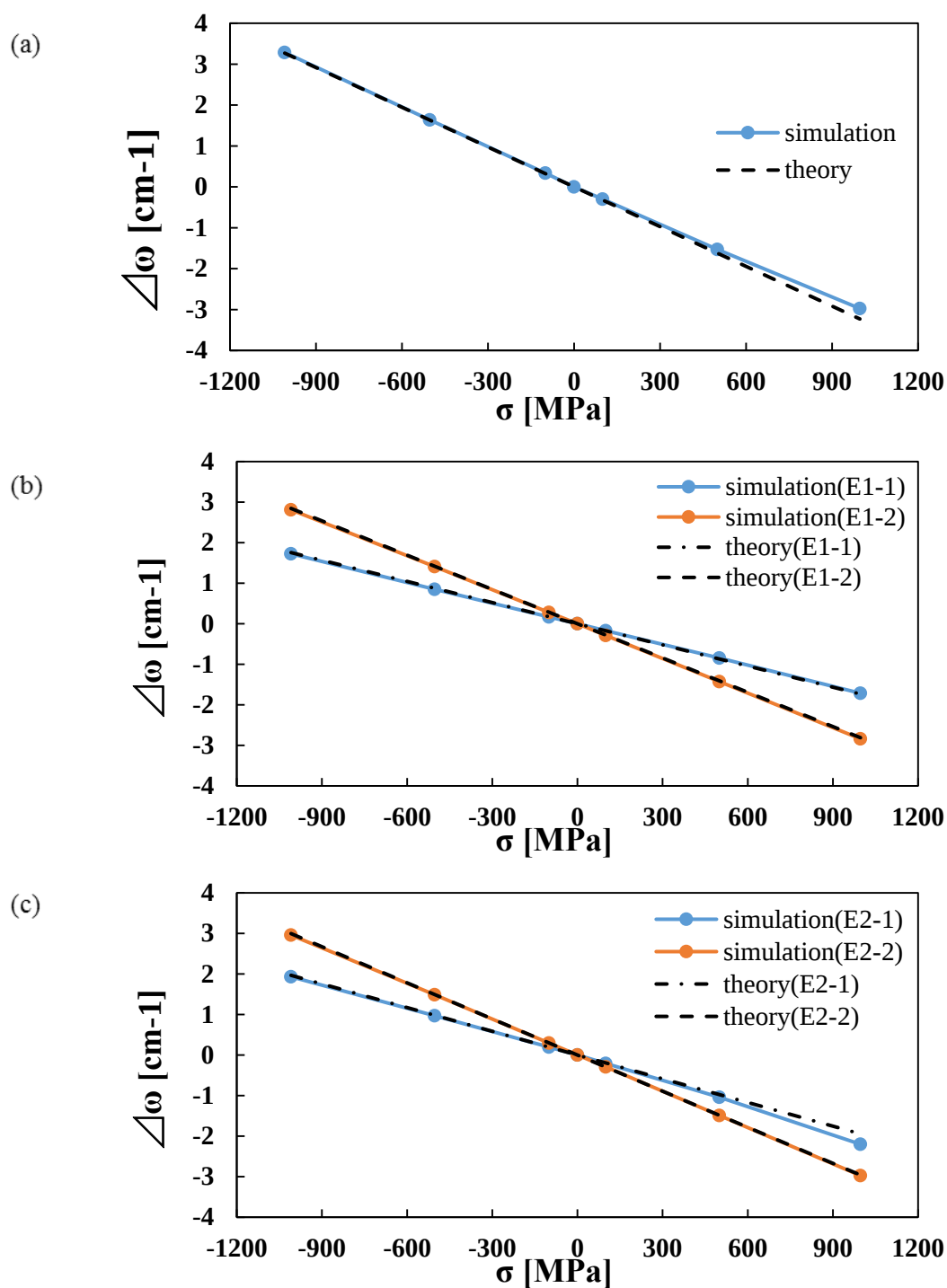


Fig. 17. Calculated Raman shift and fitted theoretical formula under biaxial isotropic stress σ on zx plane (a)A1 mode (b)E1 mode (c)E2 mode

2.4.6 三軸等方応力

本項では, x, y, z の3軸方向に等方応力をかけた場合の応力, ラマンシフトの関係について得られた結果を示す.

3軸等方応力の条件下では, 応力-ラマンシフト変換式は2.4.3項で得られた結果を用いると次のように表現される. 各軸方向での応力値を σ [GPa]と表す. 引っ張りを正とする.

$$\begin{aligned}\Delta\omega_{A1} &= -3.93\sigma \\ \Delta\omega_{E1} &= -3.93\sigma \\ \Delta\omega_{E2} &= -4.14\sigma\end{aligned}\tag{2.10}$$

Fig. 18 に3軸等方応力とラマンシフトの関係を式(2.10)で与えられる関係とともに示す. $A1, E1, E2$ 全てのモードについて, 応力の大きさに関係なくシミュレーション結果と理論式が一致していることが確認できた. 3軸等方応力の状態ではせん断応力成分が存在しないため, その他の応力状態で見られた差異が発生しなかったと考えられる. この結果は, シミュレーション結果と理論式の差異が xy 平面におけるせん断応力成分の有無やその大きさにより決まるとする予測を支持していると考えられる.

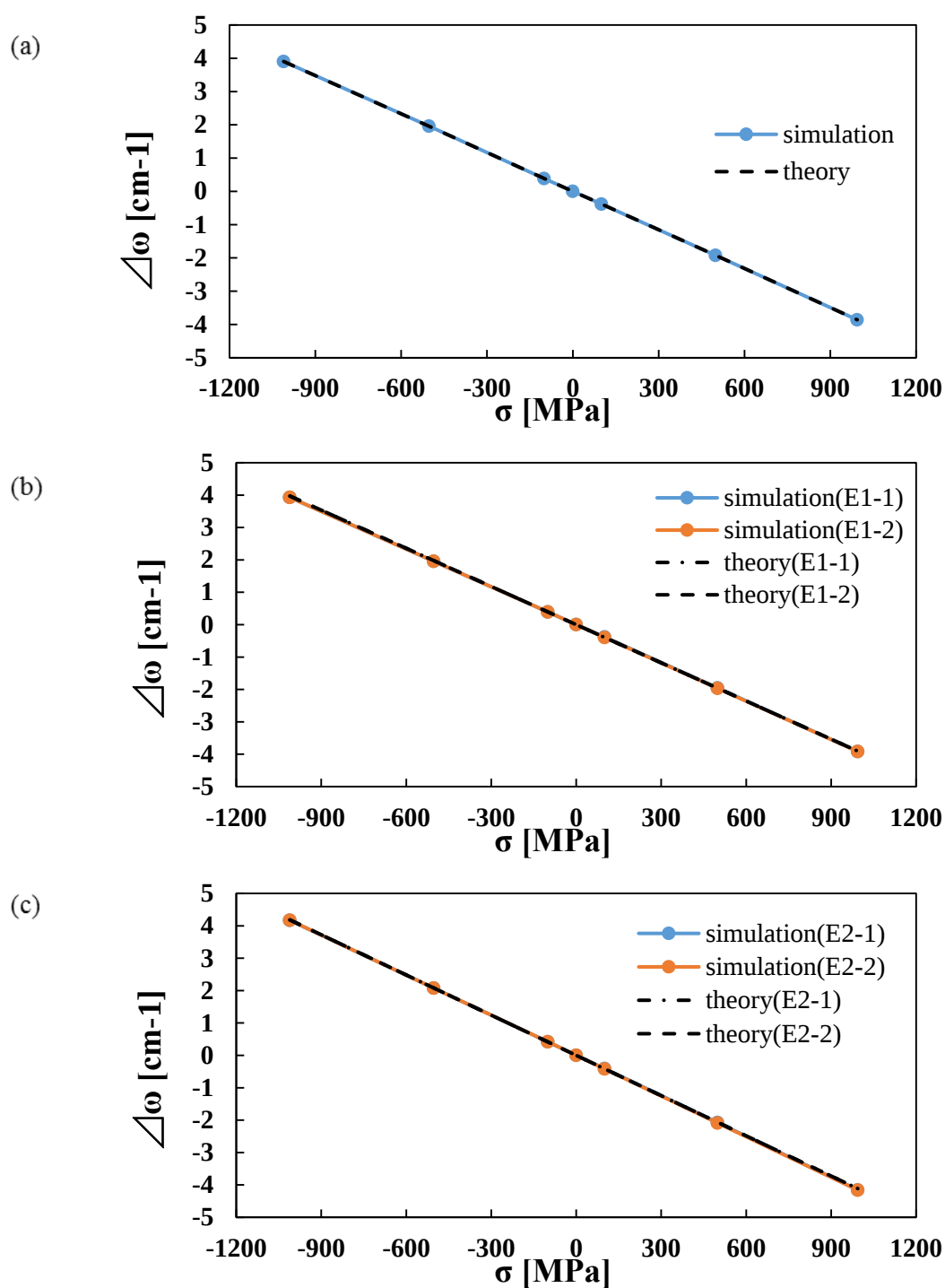


Fig. 18. Calculated Raman shift and fitted theoretical formula under triaxial stress

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

2.5 妥当性の確認, 考察

2.5.1 静水圧での実験との比較

Olego は立方晶である 3C-SiC に静水圧をかけた場合の TO フォノンの振動数を実験により取得し, 静水圧 σ (GPa)と振動数 Ω_{TO} (/cm)の関係が以下の式で与えられるとした [13]. 静水圧についての式であるため, 本式において σ は圧縮が正である.

$$\Omega_{\text{TO}} = (796.2 \pm 0.3) + (3.88 \pm 0.08)\sigma - (2.2 \pm 0.4) \times 10^{-2}\sigma^2 \quad (2.11)$$

4H-SiC と 3C-SiC の結晶構造違いは c 軸方向の積み重なり方であるため, c 軸(z 方向)と垂直な xy 平面内での振動について固有振動数は結晶多形の違いの影響はあまり受けないと考えられる. そこで本研究では xy 平面内の振動であり, 振動数が近い E1 モードを用いてフォノン変形ポテンシャル係数の比較を行う. 静水圧における E1 モードの応力(σ)-ラマンシフトの関係は式(2.5)より次のように与えられる.

$$\Delta\omega_{E1} = 3.93\sigma \quad (2.12)$$

応力が小さい(< 1.0GPa)領域においては式(2.11)における 2 次の項は十分小さく無視できるため, 1 次の項までに限り実験とシミュレーションの結果を比較すると, シミュレーション結果は実験での 1σ 区間に収まっており実験結果と一致していることが確認できる.

2.5.2 四点曲げ実験との比較

4H-SiC に対して応力とラマンシフトの関係を求めた実験には Sugiyama らによる 4 点曲げ実験がある [14]. Sugiyama らは 4 点曲げにより表面を試験面の引っ張ることにより一軸応力と E2 モードの振動数変化の関係を測定し, 以下の関係を得ている. 引張方向は y 軸方向である.

$$\begin{aligned} \Delta\omega_{E2} &= -1.96\sigma & (0001)\text{面上} \\ \Delta\omega_{E2} &= -2.08\sigma & (11\bar{2}0)\text{面上} \end{aligned} \quad (2.13)$$

応力が低い状態では, 縮退した E2 モードのピークの分裂は小さいため, 実験においては察可能なピークの値は両者の平均値になると考えられる. このことを考慮すると, 本研究で得られた E2 モードに関する y 軸方向一軸引張での応力-ラマンシフトの関係は式(2.5)より, 以下のように与えられる.

$$\Delta\omega_{E2} = -1.68\sigma \quad (2.14)$$

式(2.13)(2.14)を比較すると、約 20 パーセントの差が見られた。実験結果にはばらつきが見られるため、この差異をそのままシミュレーション結果と実験結果の差異であるとする事はできないが、本結果に基づき応力-ラマンシフトの変換を行う場合には最大 2 割程度の誤差を有することに注意されたい。

2.5.3 シミュレーション結果と理論式の比較

2.4 節の結果より、応力が低い状態では 4H-SiC の応力-ラマンシフトの関係は Briggs により算出された理論式 [3]に従うことが確認された。一方で、応力の大きさが 500MPa より大きい状態では、応力が大きくなるに従いシミュレーション結果が理論式から乖離してゆく場合があるという結果が得られた。また、各応力状態での結果によりこの乖離には xy 平面のせん断応力が関係していることと考えられる。本稿ではこの現象の原因について考察する。

乖離の原因としては、ひずみが大きくなることで大変形による非線形的な効果の影響、やシミュレーション自体の収束性の問題等が考えられる。

A1 モードを例に考える。Briggs の理論式は、 C_{6v} 対象群に属する CdS を対象に結晶の対称性に基づいて振動モードとひずみの関係を導出しており、各振動モードの振動方向に対応したひずみの 1 次の影響のみ考慮している。そのため、この理論では対称性に基づき A1 モードの振動は z 軸と平行な振動であるはずである。また理論式は一軸応力による影響を仮定しているため、せん断応力のような多軸に及ぶ応力の影響を明示的には考慮していないと考えられる。一方、シミュレーションで得られた A1 モードの振動方向は、z 軸方向の振動が支配的ではあるものの z 軸と垂直な方向にも振動が見られた。Fig. 19 にシミュレーションで得られた A1 モードにおける原子の振動方向と z 軸のなす角とせん断応力 τ_{xy} の関係を示す。応力が大きくなるに従い、原子の振動方向と z 軸の成す角が大きくなり、z 軸に平行な振動であるとする結晶対称性に基づく議論と乖離してゆく事がわかる。このことより、結晶にせん断ひずみが生じたことにより A1 モードの振動方向に変化が生じたことが、振動数に非線形的な影響を与えシミュレーション結果と理論式の乖離を招いていると考えられる。

結晶の対称性を考慮すると、無ひずみの状態において縮退を起こしていない A1 モードの固有振動が対称な平面である xy 平面の 1 方向のみに傾いていることは考えにくい。そのため、この差異の原因はシミュレーション側にあると考えられる。2.4.1 項に示したとおり、弾性定数の計算において本シミュレーションの結果と実験結果には約 5% 程度の差が生じている。このことより、無応力状態における応力、構造緩和の収束計算が不十分であり、振動方向や弾性定数の計算に影響を与えてしまっていることが考えられる。また、大変形による原子構造の変化の影響が非線形的な影響を及ぼしている可能性も否定できない。

しかしながら、シミュレーションの収束性に起因する振動方向の傾きの変化や大変形による非線形的な効果は、応力が小さい状態では影響を与えないと考えられる。そのため本研究で算出した応力と振動数変化の関係にたいしてこれらの影響は有意な影響を与えていないと考えることができる。そのため、これらの現象により本研究で算出したフォノン変形ポテンシャル係数の妥当性が損なわれることはないと考えている。

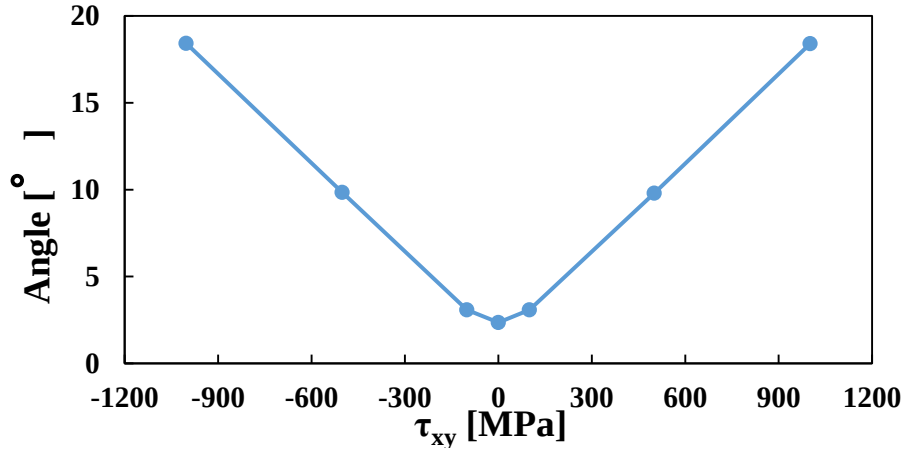


Fig. 19. Average angles between direction of A1 mode vibration and z axis under shear stress τ_{xy}

2.6 結言

本章では第一原理計算に基づき、4H-SiC における応力とラマンシフトの定量的な関係を求めた。実験との比較により、本研究で求めた関係式は一定の妥当性を有することが確認された。1GPa 程度の強い応力がかかる場合にはシミュレーションと理論式の間にはシミュレーションの収束条件に起因すると考えられる差異が生じる場合があるが、この現象により算出したフォノン変形ポテンシャル係数の妥当性は損なわれまいと考えられる。

第3章 有限要素法によるデバイスの残留応力評価

3.1 緒言

第2章で得られた応力-ラマンシフトの関係は、応力をラマンシフトに変換するものであり、成分の違ひからラマンシフトの結果のみを用いて応力分布を詳細に評価することは難しい。また、作成したデバイス全てに対してラマン分光測定を行うことも現実的ではないため、シミュレーションによりパワーデバイスの応力分布を求める手法が必要となる。本章では対象とする 4H-SiC MOSFET の構造、応力分布のラマンシフト分布への変換手法、有限要素法による製造プロセスに従った多段階熱応力解析の手法及び結果、ラマン分光実験との比較検証結果について述べる。

3.2 4H-SiC MOSFET の構造

本節では、研究に用いた 4H-SiC MOSFET の構造について説明する。尚、本節の大部分は村上による論文 [4]を参考に作成している。

本研究は Cree 社製 n 型 SiC-MOSFET CPM2-1200-0035B を対象とする。Fig. 20 にゲート絶縁体付近の断面の電子顕微鏡写真を、Fig. 21 に Fig. 20 を元に作成され MOSFET の構造模式図を示す。MOSFET は Fig. 21 の構造が x 軸方向に周期的に繰り返された構造をしており、断面に垂直な y 軸方向に対しては一様な構造になっている。後述する FEM 解析はこの模式図に基づいてモデルの作成している。ソース電極下の(n+),(p)と表記されている領域はそれぞれリン等のドーピングにより形成される n 型半導体部分と、アルミニウム等のドーピングにより形成される p 型半導体部分である。これらの領域は Fig. 20 には現れていないが、走査型静電容量顕微鏡(SCM)によるキャリア濃度分布の測定により確認されている。この MOSFET 構造はプレーナ型縦型 MOSFET と呼ばれ、高耐圧、大電流、低 on 抵抗といった特徴を持つ。ゲートに電圧がかかっていない状態ではソース、ドレイン間の pnp 接合により電流が流れないが、ゲートにかかる電圧が閾値を越えることにより SiO₂ 絶縁膜直下に反転層が形成されソース-ドレイン間に電流が流れる。そのため、ゲート酸化膜下部やソース電極と SiC の界面付近の応力がデバイスの特性に影響を与えると考えられる。

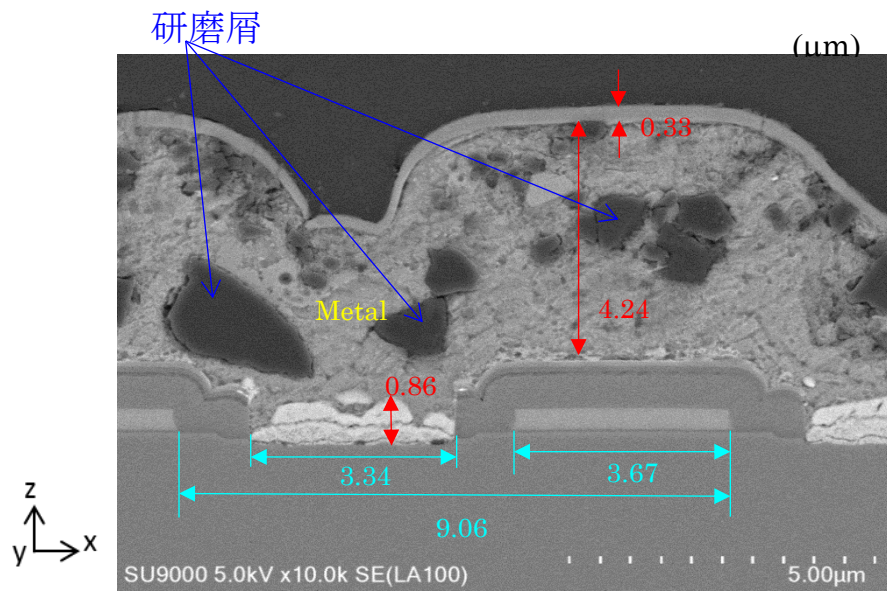


Fig. 20. Electron micrography of MOSFET [4]

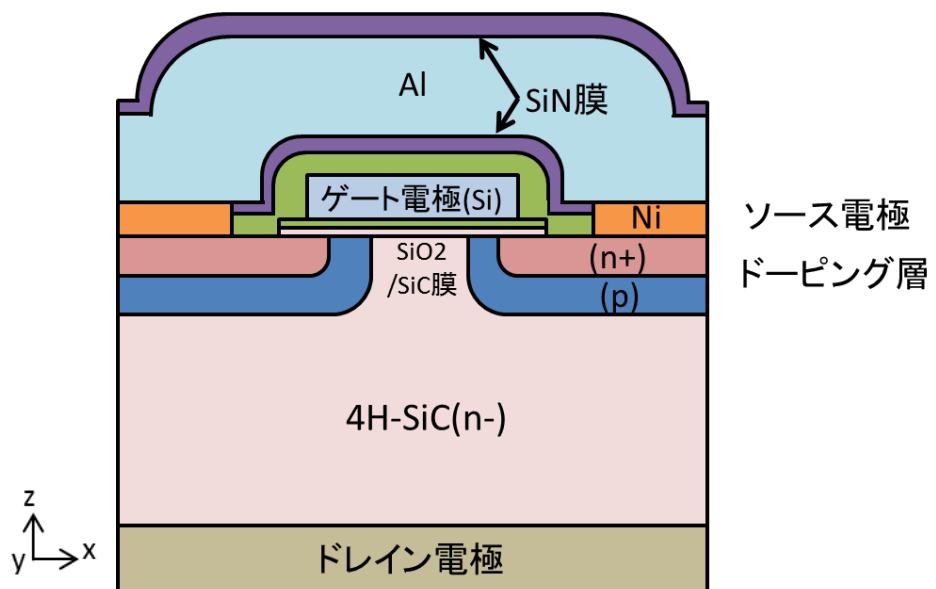


Fig. 21. Diagram of SiC MOSFET [4]

3.3 応力分布のラマンシフトへの変換

本節では有限要素法解析で得られた応力分布をラマンシフトの分布へと変換する手法について説明する。

2.2 節で述べたとおり，ラマン分光測定は対象に照射したレーザーの散乱光の波長を測定することにより行われるため，その解像度は入射するレーザーのスポット径に依存し得られる結果はレーザーを入射した領域の平均値となる．本研究で比較対象とするラマン分光測定実験のスポット径は $0.7\mu\text{m}$ であるため，本研究でも得られた応力分布を実験のスポット径に応じた領域でサンプリング，平均化した上でラマンシフトの分布を算出する。

Fig. 22 に平均化するスポット径とサンプリング点を示す．スポットの中心に 1 点，径がスポット径の $1/2$ (半径 $0.35\mu\text{m}$) である円周上の 8 点，スポット径の円周上の 8 点の計 17 点をサンプリング点とする．一般にレーザー光の任意の点の強度は半径方向に対してガウシアン分布となる [15]ため，中心の強度に対しスポット径の円周上の強度が $1/e^2$ となるガウス分布に従い重み付けを行う．

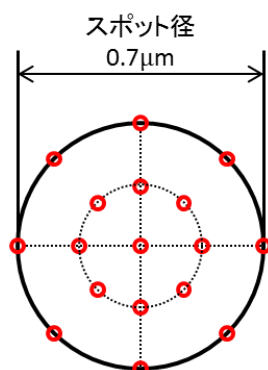


Fig. 22. Position of sampling points in laser spot

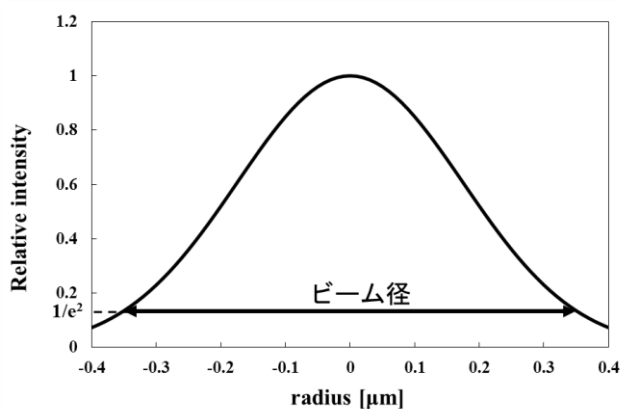


Fig. 23. Normalized intensity distribution of laser beam spot

各サンプリング点における応力は、有限要素法解析によって得られる接点応力を用いてアイソパラメトリック要素による内挿 [16]によって算出する。以下に大まかな手順を示す。アイソパラメトリック要素では、要素内の任意の座標 (x,y) は各接点の座標とパラメータ (ξ,η) を用いて次のように表される。

$$\begin{aligned} x(\xi, \eta) &= N_i x_i + N_j x_j + N_k x_k + N_l x_l \\ y(\xi, \eta) &= N_i y_i + N_j y_j + N_k y_k + N_l y_l \end{aligned} \quad (3.1)$$

ここで x_i, y_i は節点の座標であり、 i,j,k,l は要素を構成する4接点を示すインデックスである。 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。

$$\begin{aligned} N_i &= \frac{1}{4}(1 - \xi)(1 - \eta) \\ N_j &= \frac{1}{4}(1 + \xi)(1 - \eta) \\ N_k &= \frac{1}{4}(1 - \xi)(1 + \eta) \\ N_l &= \frac{1}{4}(1 + \xi)(1 + \eta) \end{aligned} \quad (3.2)$$

座標 (x,y) にサンプリング点の座標を代入して計算することにより、 (ξ,η) を求めることができる。本研究ではニュートンラプソン法による収束計算により算出を行った。得られた (ξ,η) 、形状関数を応力の各成分について以下の式に用いることでサンプリング点での応力を求めることができる。

$$\sigma(\xi, \eta) = N_i \sigma_i + N_j \sigma_j + N_k \sigma_k + N_l \sigma_l \quad (3.3)$$

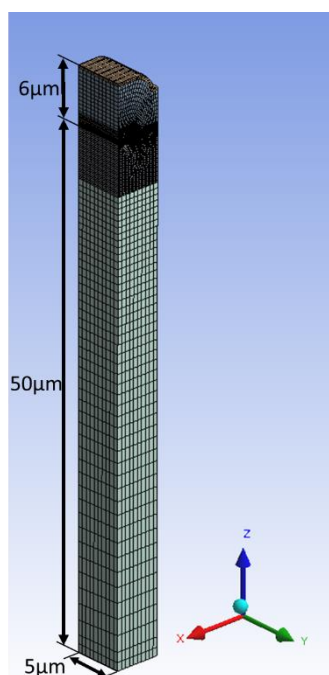
得られた各サンプリング点での応力をガウス分布に従って加重平均化することによりスポットにおける応力とし、第2章で算出した結果に基づきラマンシフトへの変換を行う。

3.4 解析条件

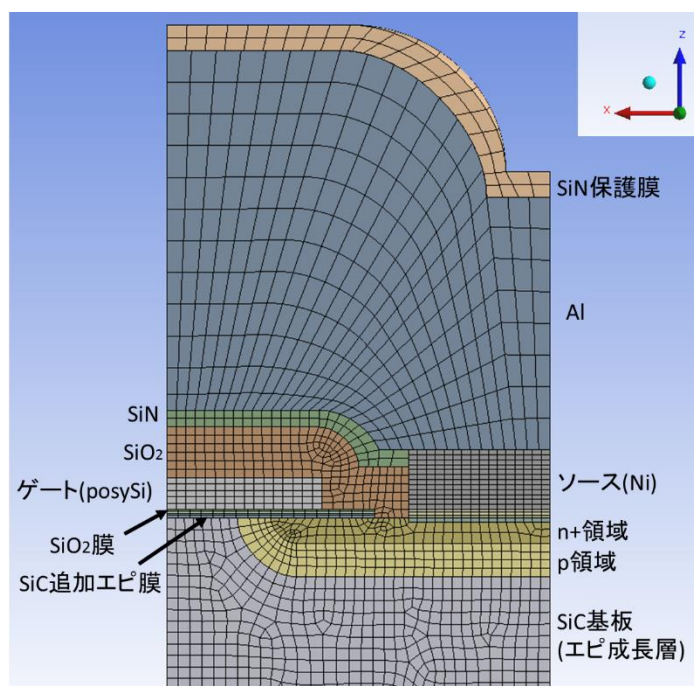
3.4.1 構造, 主な条件

Fig. 20, Fig. 21 を元に 3 次元有限要素モデルを作成した。作成したモデルの全体図及び MOS 付近の拡大図を Fig. 24 に、上面図を

Fig. 25 に示す。SiC チップの厚さは $180\mu\text{m}$ 程度であるが、MOS から十分離れた領域には応力が発生しないため高さ方向は MOS から十分離れたと考えられる $50\mu\text{m}$ としている。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、向かい合う面は面に垂直な方向の変位が一致するカップリング拘束とした。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、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。Table 8 に解析に主な解析条件を示す。



(a) Overall view



(b) Detail view

Fig. 24. FE model of MOSFET

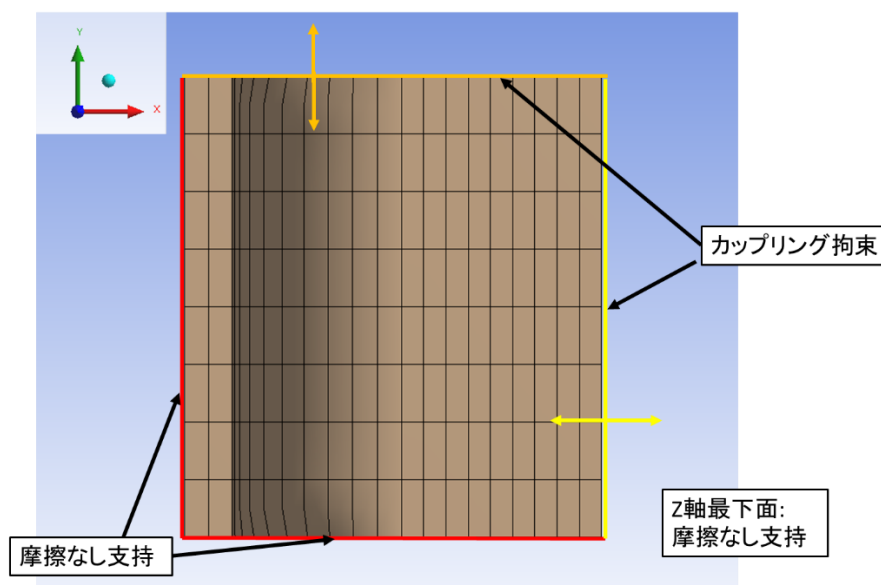


Fig. 25. Top view and boundary conditions

Table 8. 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	27928
節点数	134914

3.4.2 材料定数

1) SiO_2 のヤング率，線膨張係数の決定

絶縁膜に用いる SiO_2 膜は成膜条件により違いが生じ，線膨張係数などの材料定数が変化することが知られている [17, 18]．特に SiC の酸化により形成される SiO_2 薄膜は SiC の結晶面(Si 面，C 面)によっても物性が変化することが報告されている． SiO_2 膜の機械的物性はゲート電極直下の応力分布に大きく影響を与えるため，事前に物性を明らかにしておくことが必要である．そこで本研究では SiC ウェーハに対して熱酸化により SiO_2 膜を付けたサンプルに対し，ナノインデンテーション試験，反り測定を行うことで， SiC を熱酸化して作成される SiO_2 のヤング率，線膨張係数を求めた．以下にナノインデンテーション試験で得られた結果と反り測定の測定概要，結果を示す．これらの測定は日産アークにて実施された．

・ナノインデンテーション試験結果

ナノインデンテーション試験により得られた結果を Table 9 に示す．酸化する結晶面の違いにより，弾性率に差異が生じている事がわかる．測定サンプルは 4H-SiC の(0001)-C 面，(0001)-Si 面をそれぞれ熱酸化させた試料計 2 枚で，後述する反り測定試験で用いたものと同一である．

Table 9. Result of nanoindentation test

	接触深さ (nm)	複合弾性率 E_r (GPa)	ナノインデンテーション硬さ H (GPa)
C 面酸化	46.3	76.9±0.81	10.4±0.21
Si 面酸化	31.0	84.2±0.84	10.5±0.05

ナノインデンテーションで測定できる複合弾性率 E_r は，圧子の弾性率 E_i と試料の弾性率 E_s の中間値として以下の式で与えられる． v_s ， v_i はそれぞれ試料，圧子のポアソン比である．本研究では圧子であるダイヤモンドの弾性率，ポアソン比として， $E_i=1000\text{GPa}$ ， $v_i=0.1$ を用いる．また，試料のポアソン比の測定はできないため，一般的な SiO_2 の値を用いて $v_s=0.17$ とした．

$$E_r = \left(\frac{1 - v_s^2}{E_s} + \frac{1 - v_i^2}{E_i} \right)^{-1} \quad (3.4)$$

式(3.4)を用いて試料である SiO_2 のヤング率を求めた結果，C 面酸化の場合のヤング率は $E_s=80.5\text{GPa}$ ，Si 面酸化の場合は $E_s=88.8\text{GPa}$ であった．一般的な SiO_2 のヤング率は 70GPa 程度であるため，SiC の熱酸化により形成された SiO_2 は一般的な SiO_2 に比べやや硬い性質を有していることがわかる．

・反り測定概要

SiC ウェーハに熱酸化により SiO_2 酸化膜を付与したサンプルに対して，加熱環境下における曲率測定を実施した．主な測定条件を Table 10 に示す．酸化膜の影響により生じる曲率を適切に計測するため，測定サンプルの曲率測定後に酸化膜を取り除いた状態で再度曲率測定を行った上，両者の差を酸化膜により生じる曲率とする．

Table 10. Condition of warpage measurement

測定手法	リアルタイム曲率測定法
測定サンプル	1. (0001-C)面酸化 SiO ₂ /4H-SiC 酸化膜厚 1.3μm, 基盤厚さ 382μm 2. (0001-Si)面酸化 SiO ₂ /4H-SiC 酸化膜厚 0.47μm, 基盤厚さ 363μm
サンプル形状	20mm×5mm の短冊状
昇温条件	1. 室温から 1000℃まで 50℃/min で昇温(昇温_1st) 2. 1000℃から室温まで戻す(降温_1st) 3. 再び 1000℃まで 50℃/min で昇温(昇温_2nd) 4. 1000℃で長時間維持した後, 室温へ戻す(降温_2nd)

・ 反り測定結果

Fig. 26 に C 面酸化サンプルの曲率と内部応力の温度依存性を, Fig. 27 に Si 面酸化サンプルの曲率と内部応力の温度依存性をそれぞれ示す. 内部応力は Stoney の式を用いて算出している. C 面酸化, Si 面酸化共に長時間の加熱後の降温(降温_2nd)でのみ, 他の測定時と異なる傾向が確認された. 長時間の加熱により生じた粘性流動により酸化膜の構造に変化が生じた影響だと考えられる.

薄膜の線膨張係数は以下の式で求めることができる. $\Delta\sigma/\Delta T$ は内部応力の温度勾配, E_f , ν_f は薄膜のヤング率, ポアソン比, α_f , α_s はそれぞれ薄膜, 基板の線膨張係数である.

$$\alpha_f = \alpha_s - \frac{\Delta\sigma (1 - \nu_f)}{\Delta T E_f} \quad (3.5)$$

昇温時の室温～800℃における内部応力の変化量を用いて線膨張係数を算出する. 簡単のため, $\Delta\sigma/\Delta T$ を一定とした直線近似により計算を行った. 計算の結果, C 面酸化サンプルの線膨張係数は $1.49 \times 10^{-6}/^\circ\text{C}$, Si 面酸化サンプルの線膨張係数は $1.90 \times 10^{-6}/^\circ\text{C}$ であった. この値は一般的な SiO₂ の値より高い値ではあるが, Sinha らによって測定された Si の熱酸化により作成された SiO₂ 薄膜の値 [18] に近いものとなった. また, 本測定の結果では酸化温度である 1000℃付近では有意な大きさの内部応力は生じなかった.

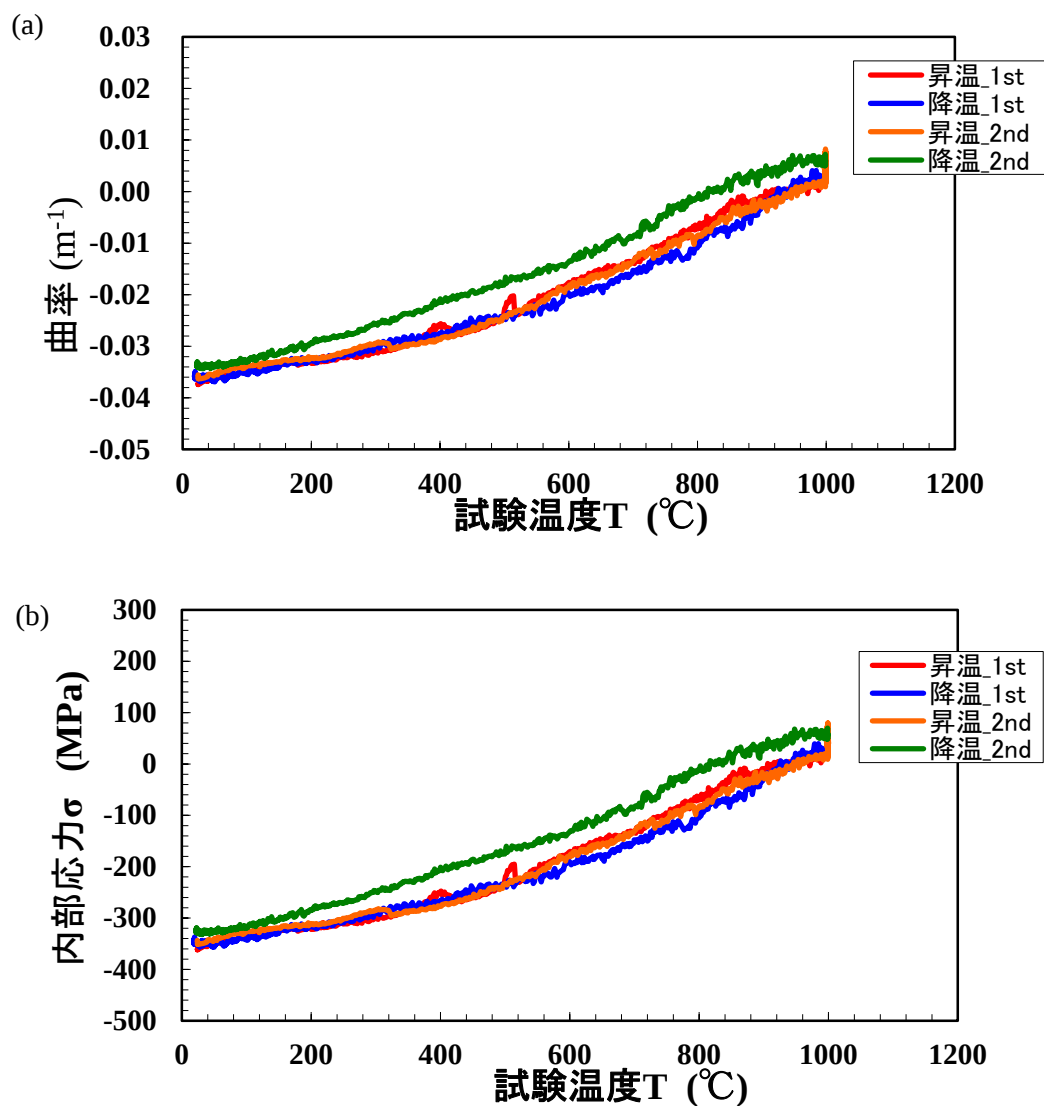


Fig. 26. Temperature dependence (a) curvature and (b) internal stress of oxide film on C face 4H-SiC

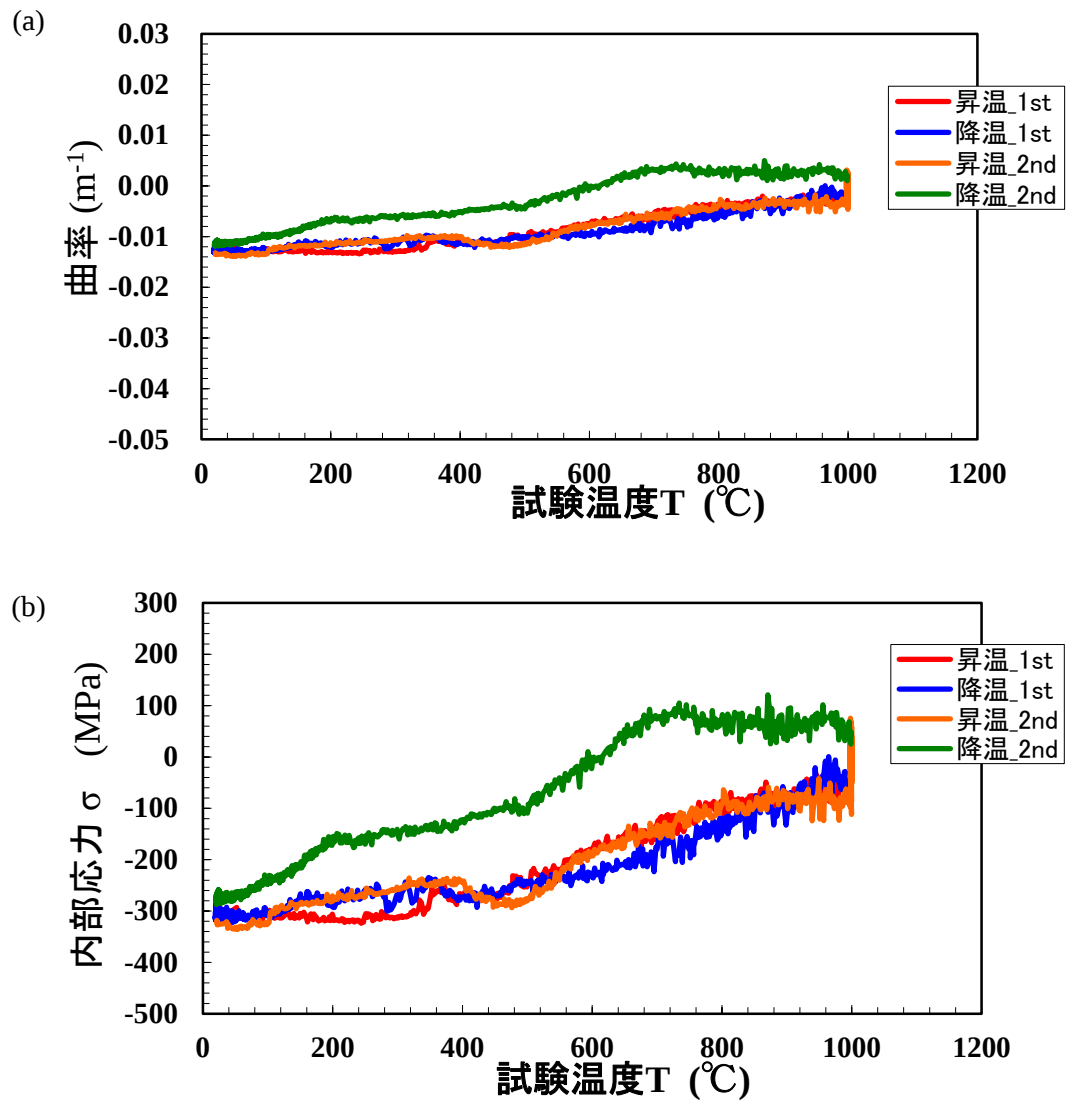


Fig. 27. Temperature dependence (a) curvature and (b) internal stress of oxide film on C face 4H-SiC

2) その他の材料定数

本研究で用いる材料の主な材料定数を Table 11 に示す.

Table 11. Elastic coefficient of materials

材料	ヤング率(GPa)	ポアソン比	線膨張係数(/°C)	Ref
SiC	Table 6(弾性定数で規定)		Fig. 28	[19]
SiN	280	0.28	Fig. 30	[20]
SiO ₂	88.8	0.17	1.90×10^{-6}	測定(Si 面)
polySi	170	0.22	Fig. 30	[20]
Ni	201	0.31	13.7×10^{-6}	[21]
Al	70	0.35	Fig. 29	[21]

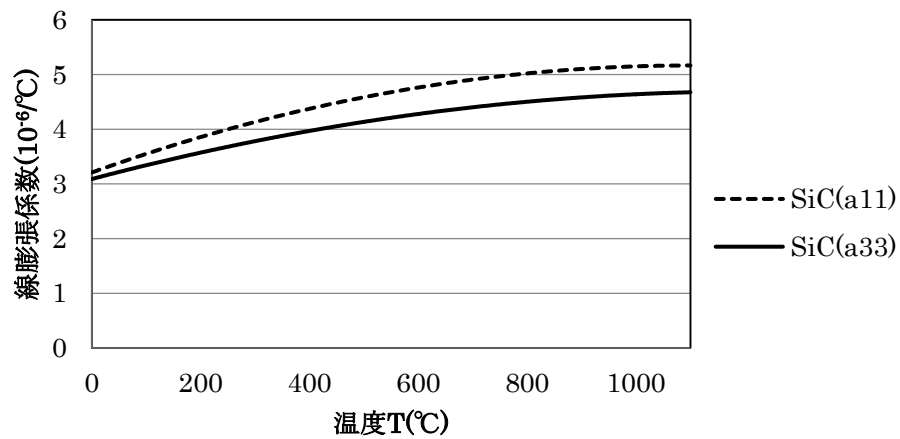


Fig. 28. Thermal expansion coefficient of SiC [19]

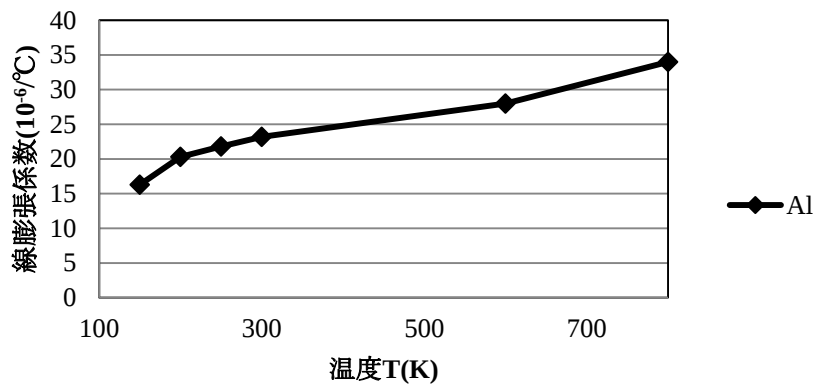


Fig. 29. Thermal expansion coefficient of Al [21]

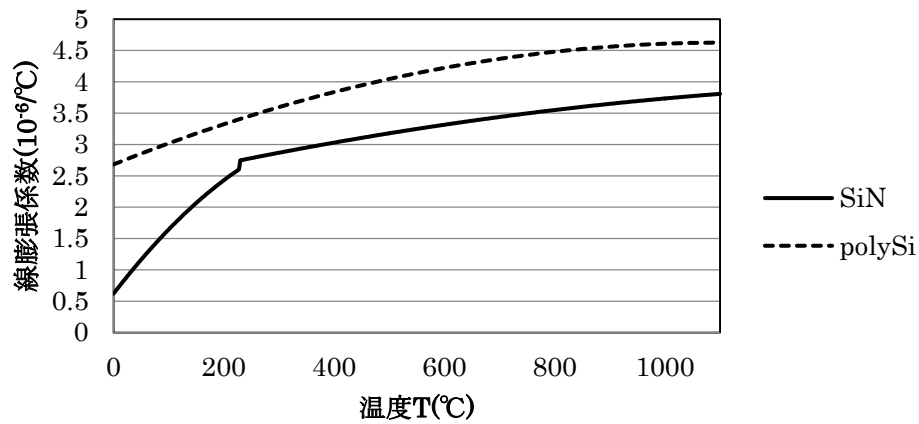


Fig. 30. Thermal expansion coefficient of SiN and polySi [20]

3.5 多段階熱応力解析，真性応力の考慮

3.5.1 多段階熱応力解析

本研究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．Table 12 に本研究で想定する製造プロセス，成膜温度，熱応力以外の応力発生原因について示す．各プロセスの詳細は以下の通りである．

- (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．

上記プロセスに従い各ステップの温度を制御することで，線膨張係数の違いに起因する熱応力の評価を行う．新たに形成される膜は，形成前には隣接部のひずみに応じて応力を発生させずに自由に変形する材料として扱い，形成後は膜の物性に従うという条件で解析を行うことで膜の形成を模擬する．

Table 12. Formation temperature of materials.

	プロセス	想定成膜温度(°C)	想定する応力発生原因
1	SiC 基板作成, ドーピング SiC 追加エピ膜形成		ドーピング, エピタキシャル成長
2	SiO ₂ 膜形成	900	なし
3	polySi ゲート電極形成	600	polySi の構造変化
4	層間絶縁膜 SiO ₂ ・SiN 形成	700	SiO ₂ , SiN の格子長の差
5	Ni のスパッタリング	22 (室温)	シリサイド化
6	Al のスパッタリング	22 (室温)	格子長差
7	保護膜 SiN 形成	300	格子長差

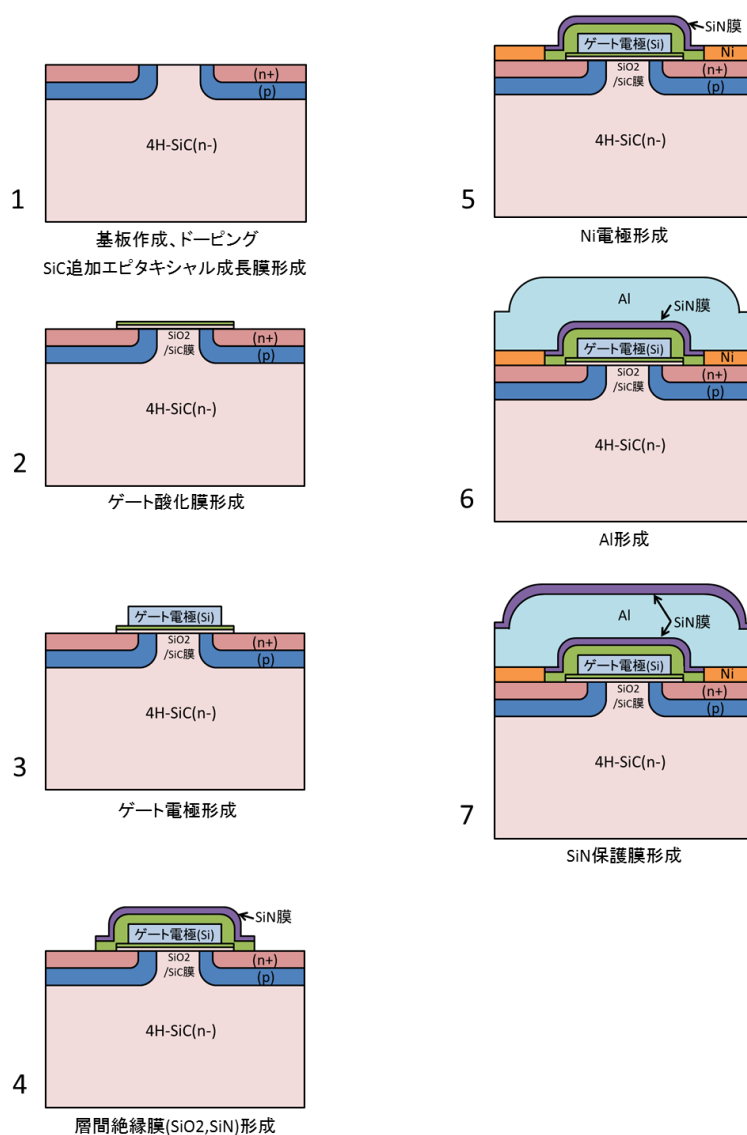


Fig. 31. Process flow of SiC MOSFET [4]

3.5.2 真性応力の考慮, 検討

各膜の製造プロセスでは状態変化や欠陥数の低下により応力が発生する場合がある。本研究ではこれらの熱応力以外の応力をプロセスに起因する真性応力と呼ぶものとする。解析途中の膜形成時に膜の内部応力として真性応力を新たに設定することはできないため、解析開始時に存在する SiC に含まれるドーピング、エピタキシャル成長層を除いた各膜に生じる真性応力については予め別途行った計算、解析に基づき成膜温度を変化させることで、発生させたい応力値に応じた熱応力を発生させることにより真性応力を模擬している。本研究では先行研究で考慮、検討が行われた [4]ソース直下におけるドーピング、シリサイド化に加え、エピタキシャル成長、ポリシリコン、SiN 起因の真性応力について考慮、検討を行った。以下、本研究で考慮している応力について述べる。

1) ドーピングで生じる真性応力 [4]

ドーピング工程では不純物を半導体材料に注入し、活性化アニールを行うことで不純物を含んだ状態での結晶構造を形成している。不純物が SiC と置換されると、不純物と SiC で平衡原子間距離が異なるため、ひずみが生じる。本研究では村上の見積もりに従い、初期応力として P 層に 10MPa, N+層に 75MPa の 3 次元等方圧縮応力を与えて解析を行う。

2) エピタキシャル成長起因応力

デバイスに使用される SiC 基板は、ウェーハにエピタキシャル成長を行うことで作成される。エピタキシャル成長では転位等の欠陥低減、不純物の添加が行われるためエピ成長層に応力が生じる。不純物濃度やエピ条件による応力の変化に関する詳細なデータは明らかでないため、本研究ではエピタキシャル成長層に 30MPa, ゲート直下に存在する追加エピ層に 60MPa の平面圧縮応力をそれぞれ想定し解析を行った。

3) シリサイド化による応力 [4]

ソース電極と半導体の界面では接合部の接触抵抗を低減させるために、高温熱処理などにより金属材料と半導体の化学反応を引き起こすことで界面にシリサイド層を形成させる場合がある。一般的に、シリサイドの形成は体積収縮を伴うため、シリサイド薄膜内部には高い引張応力が残留する場合がある [22]。SiC に対してシリサイド化を行った際に発生する応力については明らかにされていないが、Si に関して Ni のシリサイド形成を行うと数百 MPa 程度の引張応力が発生することが報告されている [23]。本研究では、Ni と SiC の界面において約 200MPa の平面引張応力が生じると仮定し解析を行った。

4) ポリシリコンの構造変化に伴う応力

ゲート電極に用いられるポリシリコン(polySi)はアモルファスシリコン(a-Si)の結晶化により作成される。一般にアモルファス相の密度は結晶相の密度よりも低いため、結晶化反応により体積収縮が生じる。基板上でこの体積収縮が生じると、界面において体積変化が拘束されるため結晶化後の polySi には高い引張応力が残留する場合がある。SiC を基板とする場合の結晶化起因応力については測定結果の報告が存在しないため、本研究では Si 単結晶基板上での結晶化反応誘起応力の測定結果 [22]を参考に、polySi 層に約 500MPa の引張応力が生じると想定した。

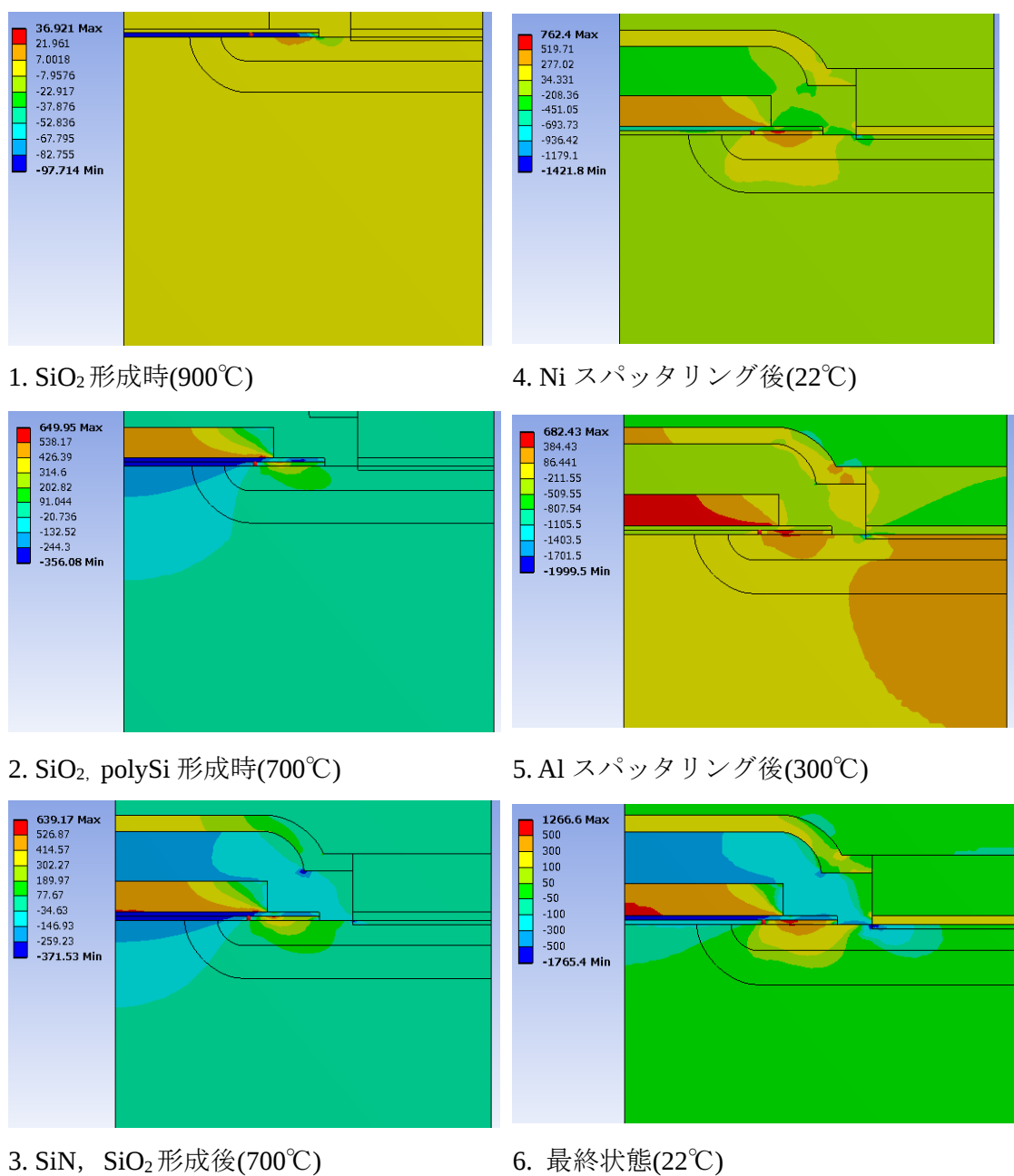
5) SiN 起因応力

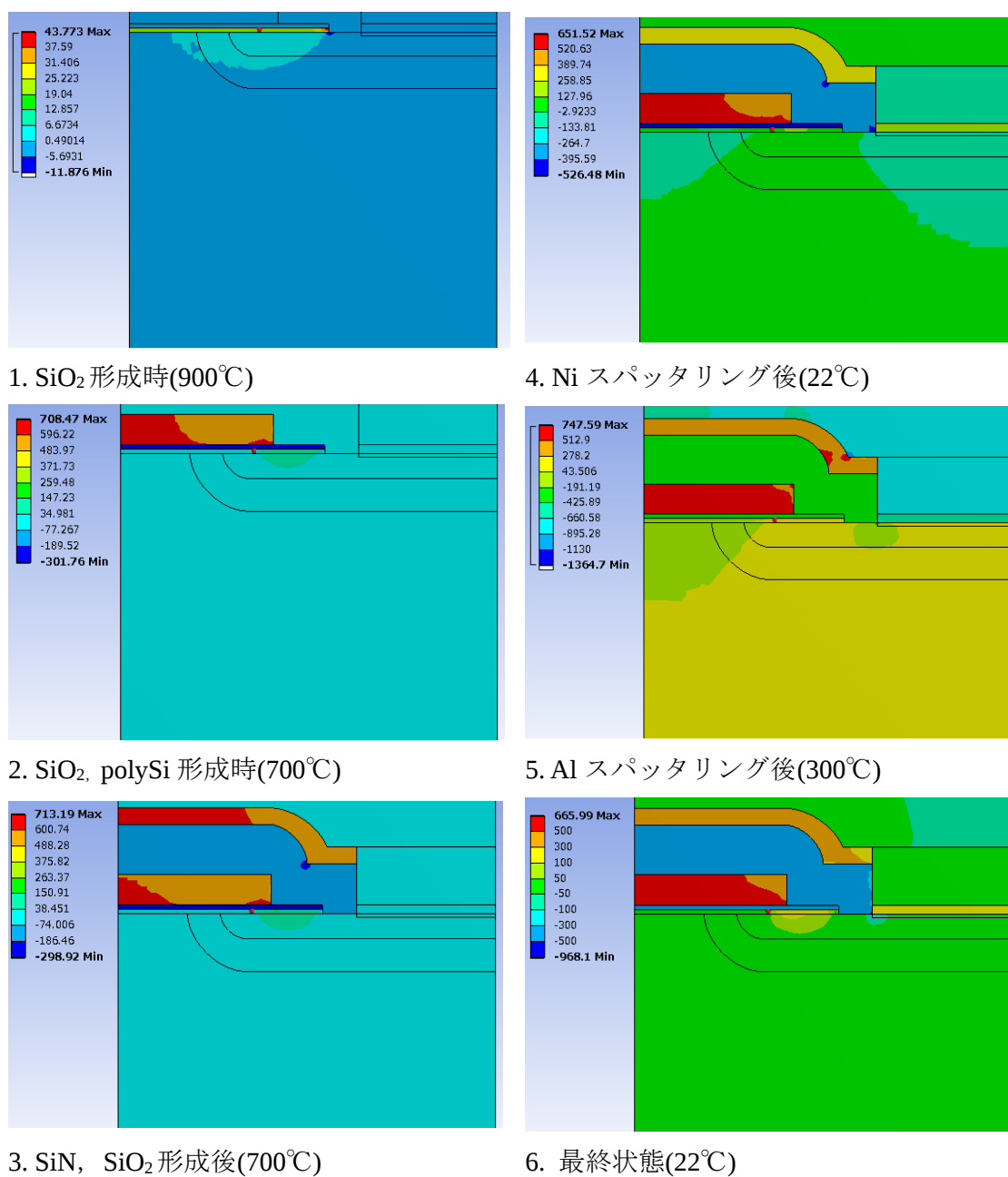
Si 基板に対し SiN 薄膜を CVD により形成すると SiN に対して最大 1GPa 程度の引張で作用する大きな真性応力が生じる場合が知られている [24, 25]。本研究では SiO₂/SiN 界面において、SiN に 400MPa 程度の応力が生じると想定した。

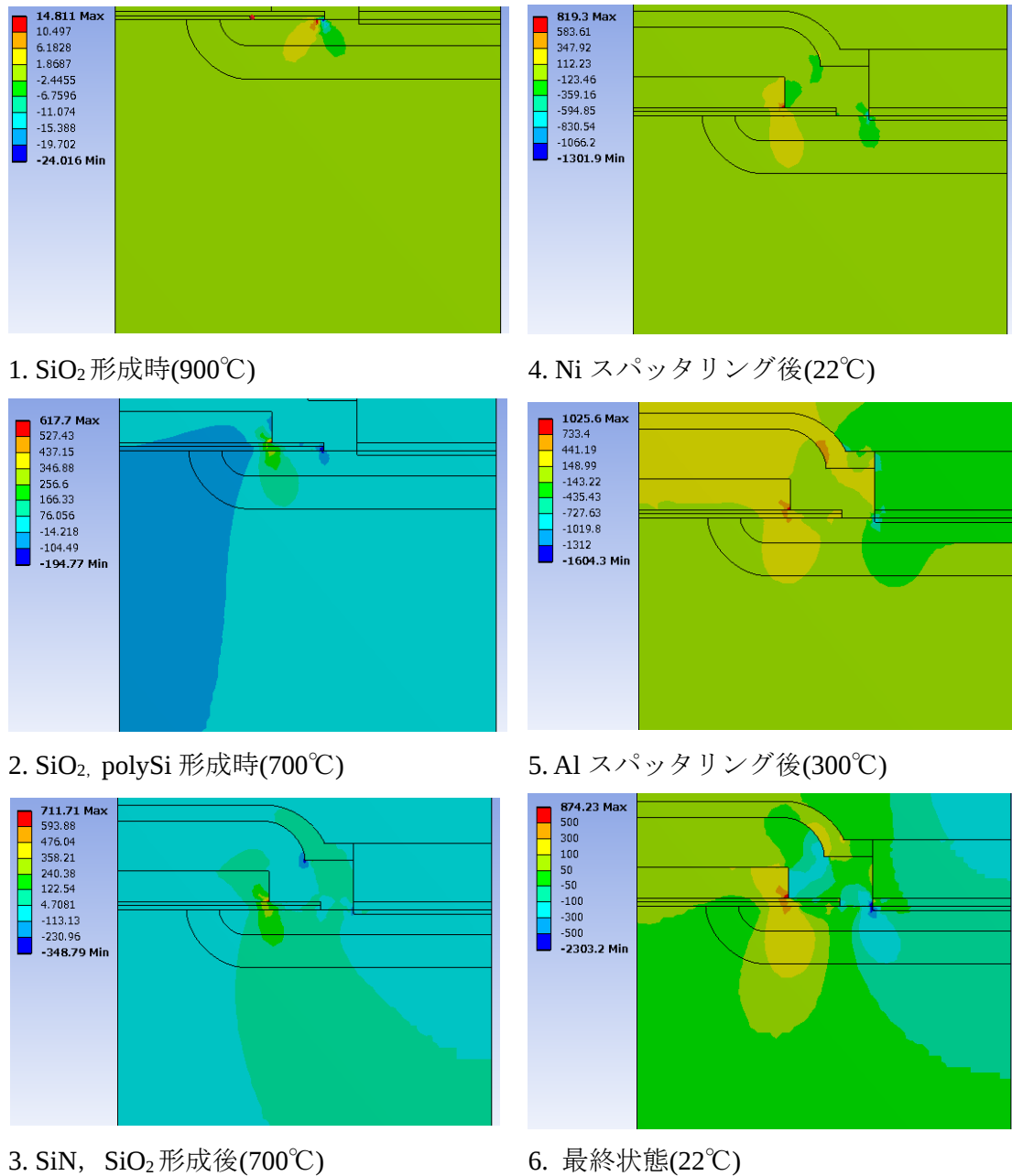
3.6 解析結果

3.6.1 垂直応力

各ステップにおける垂直応力の分布を x, y, z 軸方向各成分についてそれぞれ Fig. 32, Fig. 33, Fig. 34 示す。ステップ 1 は SiC 基板のみで 900°C に昇温した状態であるため、初期状態から基板に存在しているエピタキシャル成長、ドーピング起因応力の影響のみ現れている。ステップ 2 は SiO₂ 酸化膜、ゲート電極の作成後、700°C に温度変化させた状態である。ゲート電極に使用されているポリシリコンの結晶化により大きな応力が生じているため、ゲート電極下部の SiC 基板に x 軸, z 軸方向の応力が分布している。ゲート直下では x 軸方向に強い圧縮応力が生じている一方、y 軸方向には圧縮応力が確認されなかった。また、z 軸方向に対しては深い領域にまで応力の分布が確認された。ステップ 3 は SiN, SiO₂ 膜を形成した直後の状態である。SiN, SiO₂ 膜がトレンチ構造をしているため、SiO₂ 膜と SiC の接触部を通じて特に z 軸方向に引張応力が生じている。ステップ 4 は Ni スパッタリング直後の状態である。それまでの工程が高温で行われているため、熱応力、真性応力の影響を受けゲート、ソース下部は圧縮傾向、両者に挟まれた領域は引張傾向となっている。この傾向はステップ 5 の Al スパッタリング、ステップ 6 の保護 SiN 膜形成を経たのちの最終的な残留応力分布においても同様である。

Fig. 32. Distribution of σ_x of each analysis step

Fig. 33. Distribution of σ_y at each analysis step

Fig. 34. Distribution of σ_z at each analysis step

3.6.2 せん断応力

SiC を用いたデバイスでは，次章で述べるように順方向劣化の問題に関連してエピタキシャル成長層における転位の移動に強い関心が抱かれている．転位の移動を考える上ではせん断応力の分布が重要となる．Fig. 35 にせん断応力各成分の分布を示す． xy, yz 方向にはせん断応力は発生しなかった． xz 方向に対してはゲート，ソース部の端点を起点に最大で 70MPa 程度の応力が広く分布する結果となった．分布する応力の大きさは深さ $5\mu\text{m}$ で $5\sim 10\text{MPa}$ 程度であり，室温付近の低温状態では応力が転位移動に与える影響は非常に軽微であると言える値であった．

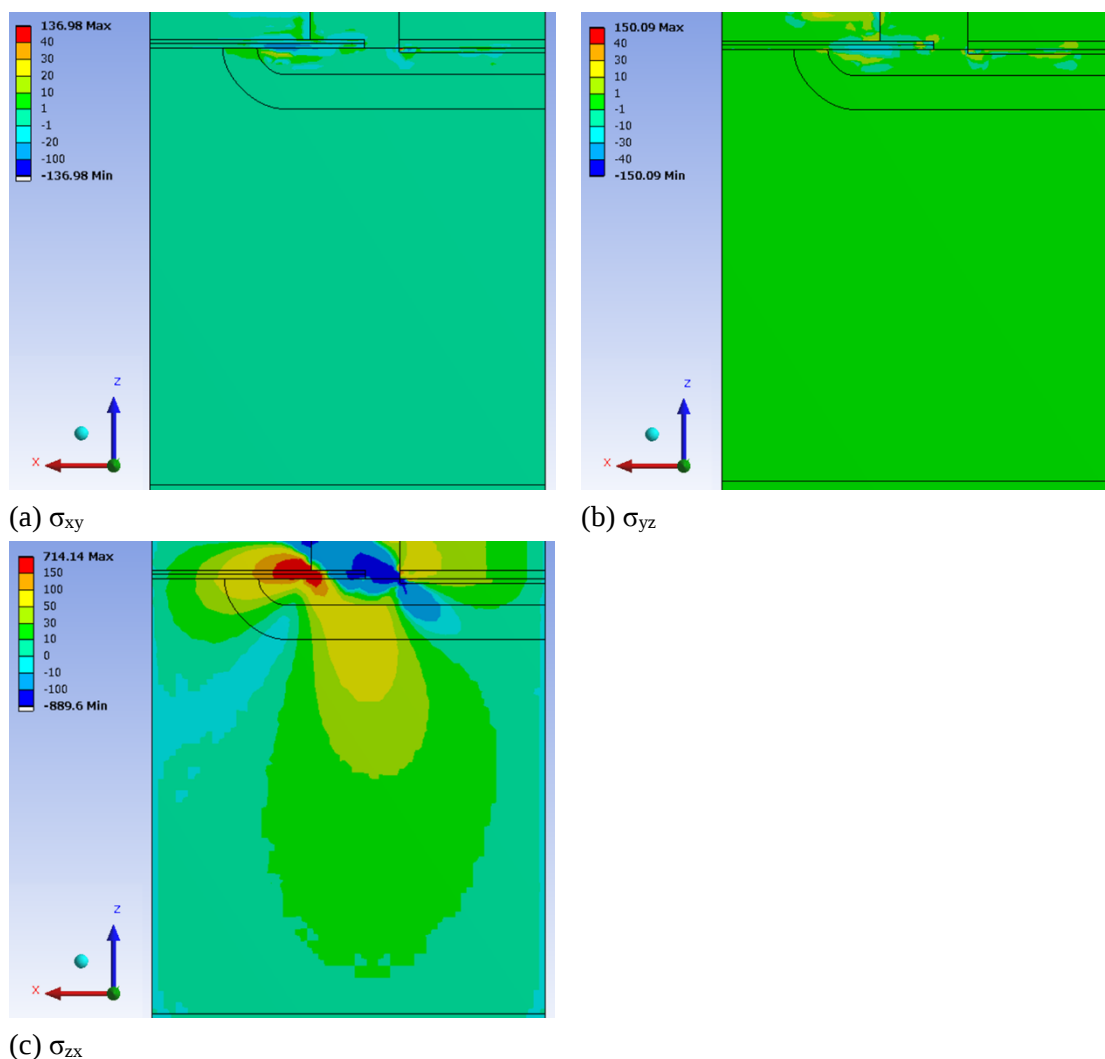


Fig. 35. Distribution of shear stress

3.6.3 ラマンシフトの分布

得られた残留応力分布に対し 3.3 節の手法を用いてラマンシフト分布を作成し、解析対象と同一の MOSFET に対して行われたラマン分光測定結果との比較、検証を行う。

まず、先行研究 [4]で行われたラマン分光測定の概要を説明する。ラマン分光測定は解析対象と同一製品である、Cree 社製 n 型 SiC-MOSFET CPM2-1200-0035B を対象に Fig. 36 に示す MOS 直下の $15\mu\text{m}\times 15\mu\text{m}$ の領域に対して行われた。測定点数は水平方向は $0.5\mu\text{m}$ 間隔に 31 点、垂直方向が $1\mu\text{m}$ 間隔に 16 点の計 496 点である。測定を行った散乱配置はレーザーの入射方向を z 方向として、 $Z(X, X+Y)\bar{Z}$ である。SiC へのレーザーの侵入深さは $100\mu\text{m}$ 程度であると考えられるため、測定断面を作成したことによる応力開放の影響は非常に軽微であると考えられる。ラマン分光測定では、ピークの振動数が約 $780\sim 800\text{cm}^{-1}$ の範囲の A1, E1, E2 モードが測定されている。これらの振動数は第 2 章の計算で求めた振動数に対応している。

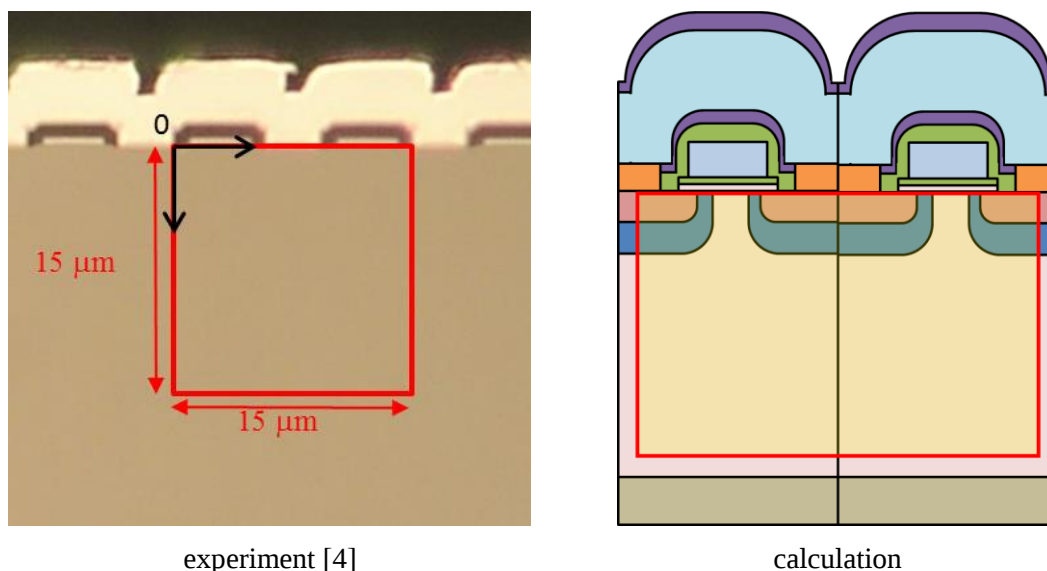


Fig. 36. Measurement area of Raman frequency shift

Fig. 37 に有限要素法解析結果から求めたラマンシフト分布とラマン分光測定結果の比較を示す。まず、水平方向の応力成分の影響が大きい E1, E2 モードの結果について比較する。応力-ラマンシフト変換式が同一形であり、係数も近いためこれらのモードにより得られるラマンシフト分布は非常に似通ったものになっている。MOS からの距離が離れるほど、応力の絶対値が小さくなるという傾向は一致しているが、MOS 直下の応力分布については解析結果に比べ測定結果は全体的に圧縮傾向であった。MOS 直下部の応力大小関係のみを考えるとゲート、ソースの間の領域が引張傾向、ゲート、ソース下部が圧縮傾向にあるという点で解析と実験結果は一致しているため、本解析で得られた応力分布に定性的には妥当性があると考えている。実験と解析の結果の際の原因と

して、実験では本解析で考慮していない要素により MOSFET 全体に圧縮応力が生じていることが考えられる。

次に垂直方向の応力の寄与が大きい A1 モードの結果について比較する。E1, E2 モードと同様、MOS 直下部の応力の大小関係は実験と解析で一致している。実験と解析の結果の大きな差異は、解析では MOS 直下の応力が分布する範囲が約 $7\mu\text{m}$ と実験に比べ深い領域に達している点、実験結果は MOS からの距離が離れるほど圧縮傾向にある点の2点である。MOS から離れた領域について、E1,E2 モードでは応力分布があまり見られないことから、垂直方向に大きい圧縮応力が生じていることが考えられる。

本研究では、SiC 基板に発生する応力としてエピタキシャル成長に伴い発生する応力のみを考慮している。エピタキシャル成長による応力分布は一般的にウェーハ、エピ層の界面で生じるミスフィット応力であるため、垂直方向に圧縮応力が発生する機構は想定されていない。実際のデバイス製造工程では電流特性向上のためにエピタキシャル成長と同時に窒素などの添加が行われているため、考慮していない垂直方向の応力の起点としてエピタキシャル成長時の不純物の添加が考えられる。過去の研究 [26, 27]で使用されたウェーハやデバイスの値を参考にするとエピ層中の窒素濃度は $10^{15}\sim 10^{18}\text{cm}^{-3}$ 程度である。しかしながら、窒素の共有結合半径は Si や C のそれに比べ短いため、不純物起因の応力は引張応力となり、また上記の一般的な窒素濃度では大きな値とはならないため、実験で見られた圧縮応力の原因としては考えにくい。そのため、結晶欠陥に起因する応力など、本解析において考慮していない要素が影響を与えている可能性が高いと考えられる。

以上の議論により、本研究で求めた応力分布は定性的に妥当な結果であることが確認された一方、定量的に一致した結果を得るためには本研究で考慮していない応力発生要因を考慮する必要性が示された。本研究では対象である MOSFET の製造工程が明らかにされておらず、また SiC デバイスに生じる各真性応力の検証、測定もまだ十分には明らかにされていない点が、定量的に高精度な応力評価を妨げている。そのため、定量的に適切な応力評価に向け、各プロセスで発生する真性応力を測定、検討した上で、製造プロセスが明確なデバイスに対して適用し、本手法を用いた定量的な評価についての検証することが今後必要となる。

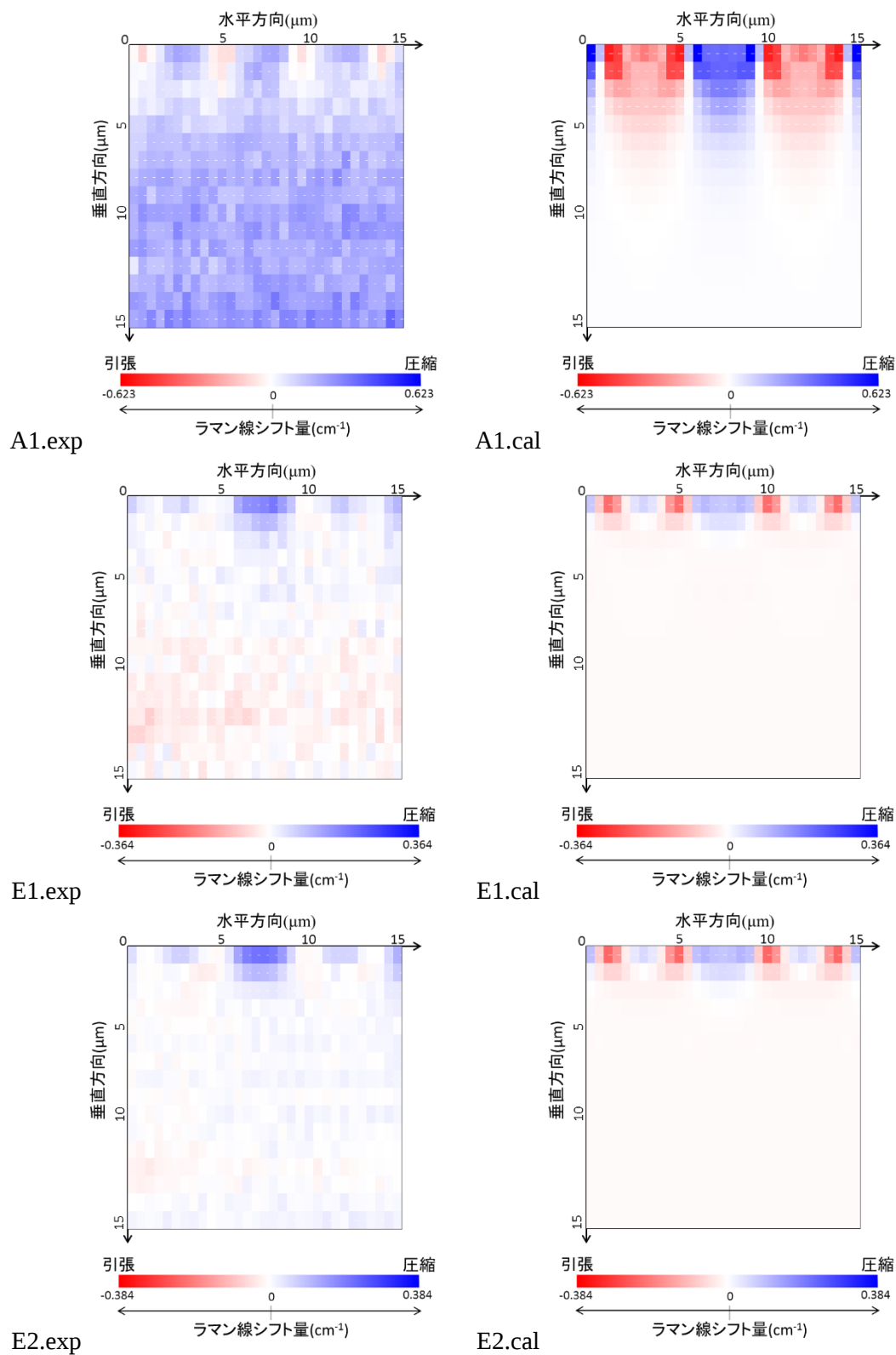


Fig. 37. Raman shift distribution (cal) calculation (exp) experiments

3.7 結言

本章では、有限要素法により MOSFET のデバイスの製造プロセスを模擬した多段階熱応力解析を行い、完成時の MOSFET の残留応力を求めた。ナノインデンテーション、反り測定による SiC 基板上に作成された熱酸化膜の物性値の取得、先行研究で示唆された各製造プロセスで生じる真性応力の見積もりを行う事により、より高精度な応力評価を行った。得られた応力分布を第 2 章で算出した応力-ラマンシフト変換式に基づきラマンシフト分布に変換しラマン分光測定の結果と比較することにより、本研究で求めた応力分布が定性的に妥当であることを示し、第一原理計算、ラマン分光測定、多段階熱応力解析を用いた応力評価手法が 4H-SiC パワーデバイスに適用可能であることを示した。

第4章 転位動力学解析に基づく積層欠陥形状の再現

4.1 緒言

4H-SiC バイポーラデバイスでは通電に伴い積層欠陥が拡大し順方向電圧が劣化するという現象が発生している。この現象の原因となっているのが REDG と呼ばれる電流印加による転位の急速な移動である。本現象の解明、抑制のために多くの研究がなされてきており、理論に基づく移動モデルも提案されているがその詳細については未解明な部分も多い。本研究では、転位動力学に共有結合材料における転位の配向性、REDG による転位移動のモデルを組み込むことにより、4H-SiC バイポーラデバイスに電流を印加した場合の転位移動を再現する。開発したシミュレータに基づき、実験での確認が難しい、多岐にわたる積層欠陥形状とその起点の関係を明確化する。

4.2 4H-SiC 中の転位

4.2.1 エピタキシャル成長と基底面転位

4H-SiC 中は六方晶であるため、結晶中の転位は c 軸に平行で動きにくい貫通転位(TD)と c 軸に垂直で動きやすい基底面転位(BPD)の 2 種類に大別される。貫通転位は不動転位であるため信頼性に与える影響は BPD より小さい。そのため、エピタキシャル成長などにおいては基盤中の BPD を貫通刃状転位(TED)へと変化することによりエピタキシャル成長層中の BPD 密度を低下させる手法がとられている。Fig. 38 にエピタキシャル成長における変換の模式図を示す。基底面を[0001]方向に 4°程度傾けたウェーハ表面にエピタキシャル成長を行うことで 4H-SiC の結晶多形を維持したまま成長膜を作成する事が可能である。エピタキシャル成長において基板に存在する BPD の 95%は TED へと変換することに成功している [28]。図中では基板のトエピ層の界面において変換が行われているとしているが、変換点にはばらつきがあり界面付近のエピタキシャル成長層中に変換点が集中していると思われる。そのため、界面付近には TED を固定点とする BPD のフランクリード源が生じる。

このため、成長後のエピタキシャル成長層には(1)変換されずに表面に達した BPD, (2)界面付近を中心に多く存在する端点を TED 変換点により固定された BPD, の 2 種類 BPD が存在する。これらの BPD は後述する積層欠陥拡大の起点として作用する。変換

されずにエピタキシャル成長層に進展した BPD を起点とする積層欠陥については多くの実験にて形状や特徴が明らかにされているが、BPD/TED 変換点に固定された短い BPD を起点とする積層欠陥については種類が多岐に渡るため、実験において観察前の状態を網羅的に把握することが難しいのが現状である。

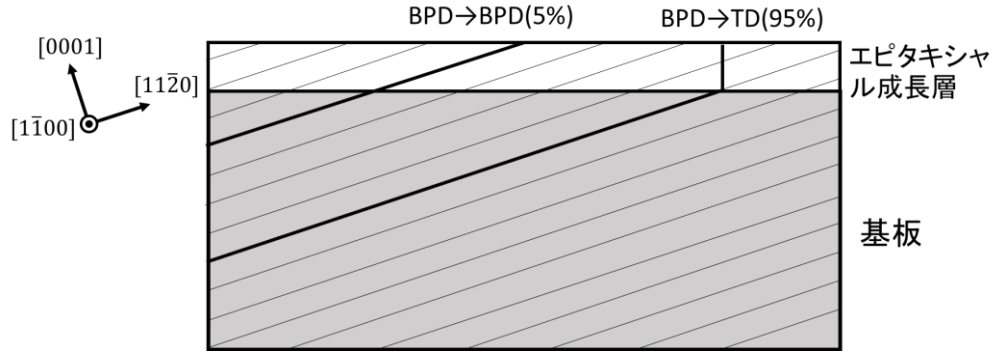


Fig. 38. Conversion from BPD to TD

4.2.2 基底面転位の分裂

Fig. 39(a)に原子 B1 がすべり運動により原子 B2 にまで動く経路について示す。完全転位である基底面転位(BPD)のバーガースベクトルに従い原子が B1 から B2 へと動く場合、原子は B1→B2 と直接移動するよりも、A 原子の間を通過して B1→C→B2 と移動する方が移動に必要なエネルギーが小さくなる。この特徴により、完全転位である BPD は以下のように B1→C と C→B2 の移動に相当するバーガースベクトルを有する 2 本の部分転位(PD)へと分解される。

$$\frac{1}{3}\langle 11\bar{2}0 \rangle \rightarrow \frac{1}{3}\langle 10\bar{1}0 \rangle + \frac{1}{3}\langle 01\bar{1}0 \rangle \quad (4.1)$$

部分転位のバーガースベクトルは結晶格子の並進ベクトルとは一致しないため、この 2 本の部分転位に挟まれた領域では積層構造のずれが生じる。この面状の欠陥はショックレー型積層欠陥(SSF)と呼ばれる。

4H-SiC は強い結合力を有する共有結合性の結晶であるため、結合の途切れ、組み換えが伴う基底面転位はパイエルスエネルギーの谷に沿った $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ で表される 6 方向に強い配向性を有する。そのため特に低温において、転位線はこの 6 方向に従う形状で観察されやすい。完全転位のバーガースベクトルもこの 6 方向であるため完全転位はバーガースベクトルと転位線の成す角に従い完全らせん転位もしくは 60° 完全転位となる。Fig. 39 (b)にこれらの完全転位の方向と分解により生じる部分転位の種類について示す。部分転位はその転位芯の種類により Si を転位芯に持つ Si-core(Si(g))部分転位と C を転位芯にもつ C-core(C(g))部分転位に分けられる。また、バーガースベクトルと転位線の

成す角により 30° 部分転位と 90° 部分転位の 2 つにわけられる. これらの組合せにより, 安定方向の部分転位は 4 種類に区分することができる. Si(g)PD はすべり運動を起こしやすいのに対し, C(g)PD は動きにくいことが報告されている. また, 90°PD は 30°PD に比べ非常に移動速度が速いことも確認している. そのため, 主な積層欠陥形状は $\text{Si(g)30}^\circ\text{PD}$ と $\text{C(g)30}^\circ\text{PD}$ の 2 種類の部分転位により形成されたと考えることができる.

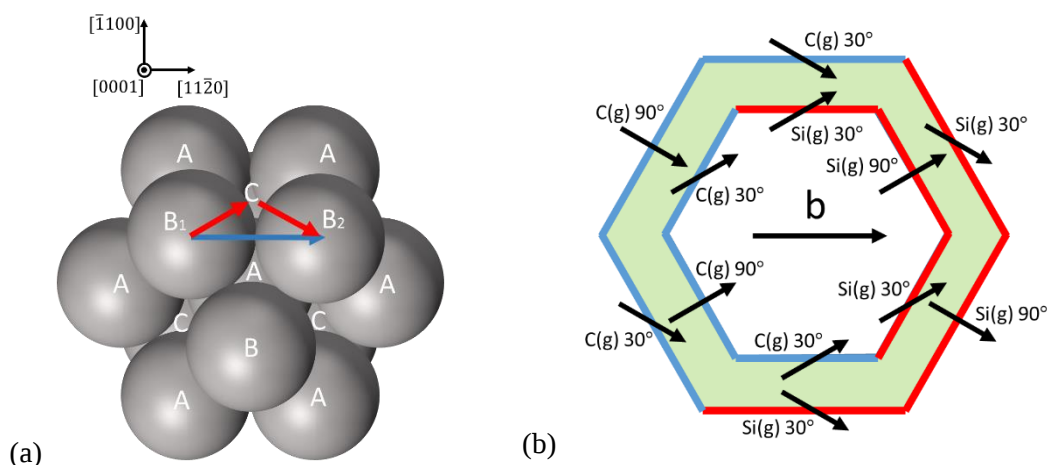


Fig. 39. Dissociation of perfect dislocation in 4H-SiC

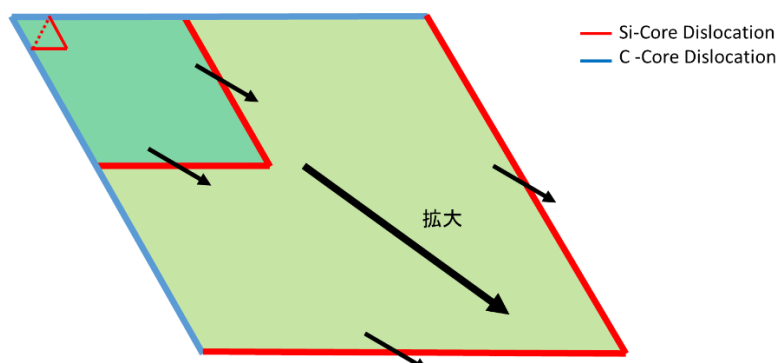


Fig. 40. Expansion of stacking fault

4.3 再結合促進転位すべり (REDG)

4.3.1 順方向劣化と積層欠陥

4H-SiC で作成された pin ダイオードに順方向電圧を印加すると, 性能が劣化することが知られている. この現象は電圧印加により拡大した積層欠陥が電気伝導に対する抵抗となることにより生じる. 電流が流れることにより積層欠陥が急激に拡大してゆく現象はこの現象は再結合促進転位すべり (Recombination Enhanced Dislocation Glide : REDG)

とよばれている [29]. SiC を用いたバイポーラデバイスの信頼性を確保する上での重大な障壁となっている本現象を抑制することは非常に重要であるが, そのメカニズムには不明点が多い. 拡大してしまった積層欠陥の更なる拡大を防ぐとは困難であるため, 順方向劣化を抑制するためには, エピタキシャル成長層に存在する基底面転位が拡大する条件とそのメカニズムを解明することが重要となる.

一般的に考えられている積層欠陥の拡大メカニズムについては次項で概説する.

4.3.2 積層欠陥エネルギーに基づく移動モデル

4H-SiC における REDG 現象についてのメカニズムには不明な点が多いが, 考えられている一般的なメカニズムについて Maeda らの議論 [6]に従い説明する.

pin ダイオードのようなバイポーラデバイスではキャリアとして, 正孔と電子の2種が存在する. この電圧を印加するとこの2種類のキャリアは向かい合う方向に移動するため, ドリフト層において電子と正孔の再結合が生じる. この再結合により生じたエネルギーが転位芯での結合を切断し, 活性化エネルギーの低下, 転位の移動を促すエネルギーとなる.

正孔と電子の再結合によるエネルギーの放出は転位の移動を促す効果はあるが, 転位移動のそのものの駆動力としては作用しない. 4H-SiC 以外の物質ではせん断応力が REDG 効果の駆動力として働く [6]が, 4H-SiC ではせん断応力が働かない条件下でも REDG による転位移動が報告されている [30]. 転位の移動方向が電流印加時には積層欠陥を拡大させる方向であり, 一方電流を印加しない状態で高温にすると転位は積層欠陥が縮小する方向に移動することがわかっている. これらの事実より 4H-SiC における REDG の駆動力は積層欠陥エネルギーの変化にあると考えられている. 積層欠陥は結晶構造のずれであるため, 通常積層欠陥形成に伴うエネルギーは正の値であり積層欠陥を縮小される方向への熱力学的な力として働く. 4H-SiC の積層欠陥エネルギーは 14.7mJ/mm と低い値である [31]. 積層欠陥の領域は, 伝導帯の下端より約 0.3eV 低いところにエネルギー準位を形成するため, 電流印加時には電子はこの低い準位に移動した方が得となる. 積層欠陥エネルギーよりも電位の移動によるエネルギーの低下が大きい場合, 電流印加時には積層欠陥が拡大する方がエネルギーが低い状態になる. そのため, 電流印加時の実行的な積層欠陥エネルギーは負となり, 積層欠陥をさせる方向へ転位が移動するための熱力学的な力として働く. この実行的な積層欠陥エネルギーの符号反転が電流を印加した 4H-SiC における転位移動の駆動力であると考えられている.

これらの議論より REDG 時の転位の移動速度は応力の効果と REDG による効果の加算による実験的な式として以下の式で与えられると考えられる. k_B はボルツマン定数, T は絶対温度である.

$$v = V_t(\tau) \exp\left(\frac{-E_{th}}{k_B T}\right) + V_e(\tau, I) \exp\left(-\frac{E_{th} - \Delta E}{k_B T}\right) \quad (4.2)$$

$$V_t(\tau) = v_0 \left(\frac{\tau}{\tau_0} \right)^m \quad (4.3)$$

$$V_e(I) = \frac{[\alpha\rho(I) - \gamma_{SF}]}{\tau_0 b} \cdot r(I) \quad (4.4)$$

4.4 本研究の位置づけ, 目的

上記の議論を踏まえると REDG の解明, 抑制に向けた研究には 2 つのアプローチを考えることができる. 1 つ目は添加する不純物などに工夫を行うことで, 再結合そのものを抑制するというアプローチである. 俵ら [32] はエピ/基板界面に高密度の窒素ドーパ層を作成することにより界面の正孔密度を低下させ, 積層欠陥の発生を抑制することに成功している. もう 1 つのアプローチが, 積層欠陥の拡大メカニズムを把握, 解明した上でメカニズムに基づいた抑制手法を検討するというアプローチである. 将来的に予想されるデバイスの高度化, 微細化へ対応した抑制策を作成するためには, 両方のアプローチで検討を進める必要がある. 本研究では, 後者のアプローチに必要である, 応力, 電流量, 積層欠陥形状などを統合して議論を行うことができるツールを作成することを将来的な目標に見据え, その基礎となる解析手法を作成することに取り組んだ.

転位の移動を解析的に予測する手法として転位動力学が挙げられる. 一般的な転位動力学手法は fcc, bcc 構造の金属や高温状態でのシリコンなど, 転位の移動がパイエルスポテンシャルに制限されない材料への適用が主であり, REDG が問題となる低温の 4H-SiC にそのまま適用することは困難である. そこで, パイエルスポテンシャルの影響が大きい材料に対して適用可能な解析手法を開発し, 低温 4H-SiC における転位, 積層欠陥形状の再現を行うことを本研究の目的とする. 開発したシミュレータに基づき, 実験での確認が難しい, 多岐にわたる積層欠陥形状とその起点の関係を明確化する.

4.5 転位動力学

本研究では転位の移動予測手法として転位動力学を用いる. 離散転位動力学では, 転位ループを複数の素片に分割し, 各線分にかかる力を計算し位置更新を随時行なうことで, 転位の運動のシミュレーションを行なう. 転位動力学はその手法により 2 種類に大別される. Lattice Methods [33] は領域を格子に分割し, 格子に含まれる転位素片を格子編に沿った方向に成分分割をし, その寄与を計算することで転位に作用する応力場を計算する手法である. 長所として応力計算のアルゴリズムが単純であること, 格子単位で

転位を空間的に離散化するため転位の位置関係の把握が単純であることが挙げられる．一方、短所として転位の存在する空間全てが格子で分割するため、解析領域が広がると計算コストが飛躍的に増大すること、成分分解した上で転位論に基づいた各成分の理論解を用いて応力計算を行なうため計算精度が低いこと、格子を用いて表現しているため複雑な転位形状を取り扱うことが困難なことが挙げられる．もう一つの手法が節点の移動により転位の移動を表現する手法で、スプライン曲線による近似、分割に基づく Parametric Dislocation Dynamics [34] と直線素線への近似、分割に基づく手法が存在する．本研究では転位線を直線素片に分割する手法を用いる．本手法の利点としては定式化、実装が比較的容易であること、数値精度、安定性が素片長さの適切な管理により期待できること、Lattice Methods のような格子形状に依存しない直線近似のため転位線の形状、空間配置の表現度が高く、把握も比較的容易であることが挙げられる．一方、4H-SiC のような配向性の高い転位線に対しては安定方向の中間状態における転位移動のモデル化が困難である点が挙げられる．

4.5.1 転位に作用する力

転位に作用する力は多岐にわたるが、4H-SiC を対象とする本研究において考慮すべき力は外力、相互作用力、自己張力、パイエルス力、鏡像力であると考えられる．以下、それぞれの力の扱いについて概説する．本研究で用いたプログラムは、小林らによりシリコンへの適用を前提に作成された転位動力学プログラム [35] を基にしているため、各手法に関する詳細、精度の検証等についてはそちらを参照されたい．

4.5.2 外力

熱応力、真性応力などによる応力場は外力として導入される．転位のすべり面に垂直な単位ベクトルを $\mathbf{n}$ 、離散化された転位素片ベクトルを $\mathbf{dl}$ とすると転位素片 $\mathbf{dl}$ に対して働く力はピーチケラーの式に基づき以下のように与えられる． $\mathbf{f}$ 、 $\mathbf{b}$ はそれぞれ、素片に作用する力およびバーガースベクトルである．

$$\begin{aligned}\mathbf{f} &= (b_i \sigma_{ij} n_j) \mathbf{n} \times \mathbf{dl} \\ f_k &= -\epsilon_{ijk} dl_i \sigma_{jl} b_l\end{aligned}\tag{4.5}$$

4.5.3 転位間相互作用，自己張力

転位線を素片分割することにより、転位間の相互作用と転位の自己張力は同一の扱いが可能である．しかし、素片間に働く力はその距離の逆数に比例するため、近接する素片間に働く力の計算に置いては数値計算的安定性を図るためにコアスプリットと呼ばれる手法を用いる [36]．同様に、素片が隣接する素片間に働く力は直線素片同士の相互作用を理論解では無限大に発散してしまうため別途適切なルールを定める必要がある．

隣接素片間の相互作用力を求める代表的な手法には Schwarz らによる Differential Stress Method [36], Zbib らによる Force Method [37, 38]などが存在するが, Differential Stress Method は曲率に応じて素片を短くする必要があるため曲率が大きい部分が存在する本計算には計算負荷が高く, 低温の 4H-SiC では自己張力の影響は小さいと考えられることから計算への負荷が比較的小さい Zbib らによる手法を用いる.

4.5.4 転位位置更新法

前述の通り, 転位の移動速度は式(4.2)に従うと考えられる. しかしながら, 共有結合性結晶であるの 4H-SiC では素線の向きにより活性化エネルギーが異なるため, 素片の向きに応じて転位の移動速度が変化の考慮する必要がある. 以下, 応力, REDG それぞれと移動速度の関係について本研究で行ったモデル化, 仮定について説明する

1) 応力と転位速度の関係

一般的に, 応力と転位の移動速度の関係は実験式として以下の式で与えられる.

$$V(\tau) = v_0 \left(\frac{\tau}{\tau_0} \right)^m \exp \left(\frac{-Q}{k_B T} \right) \quad (4.6)$$

m , v_0 , τ_0 は材料に依存した定数である. 4H-SiC に対しては $m=1.2 \pm 0.1$ 程度であるとする実験結果が報告されている [39]. v_0 , τ_0 は明確ではないため, 本研究では Si に対して用いられている値を用いて $v_0 = 7.2 \times 10^{10} \text{ nm/s}$, $\tau_0 = 10 \text{ MPa}$ とした.

Q は転位移動の活性化エネルギーである. 実験では 30°Si(g)PD の活性化エネルギーについて $Q = 1.35 \text{ eV}$ [40]であることが報告されている. C(g)PD については直接測定を行った報告はないが, 材料の変形に基づく完全転位の活性化エネルギーの測定結果 [41]が $E_{th} = 2.47 \pm 0.2 \text{ eV}$ であること, 完全転位の移動は移動速度の遅い部分転位が律速であることから C(g)の活性化エネルギーは $Q = 2.5 \text{ eV}$ 程度との予測がある.

4H-SiC のような強い共有結合を有する結晶ではパイエルの谷に沿った方向に存在する安定状態の転位が動くためにはパイエルポテンシャルを乗り越えるキンクの生成及び生成されたキンクの移動が必要となる. そのため, 転位線の移動に必要なエネルギーはキンクの生成エネルギー $2F_k$ と W_m の加算により表現される [42]. 簡単のため, エントロピーに関する項は無視し, 実験で観察可能される転位移動の活性化エネルギーがこれらの値と結び付けられると考えると, 次の式が成り立つ.

$$Q = 2F_k + W_m \quad (4.7)$$

$2F_k$, W_m の値は第一原理計算, 反応経路計算等の原子的な議論により見積もられている. Table 13 に Yang により 3C-SiC に対して行われた反応経路計算の結果 [43]を示す. この計算結果から, 90° 転位は 30° 転位に比べ活性化エネルギーが低く, 非常に速い速度で移動することがわかる. この結果は実験で確認されている結果にも一致している [40]. また, 転位線の向きがパイエルスの谷に沿っていない場合, その転位は安定な方向の転位に多くのキンクが生じている状態だと解釈できるため, 移動をするために新たなキンクを生成する必要がない. その為, 転位の移動に必要な活性化エネルギーは低下するはずである. このため, 4H-SiC では 30° 転位のみが安定に存在しており, 他の方向の転位は活性化エネルギーが低く急激に移動してゆくと考えることができる.

Table 13. Activation Energy of Dislocation motion [43]

Dislocation	$2F_k$	W_m	$Q = 2F_k + W_m$
90° C-Core	0.445	0.22	0.665
90° Si-Core	0.371	0.11	0.481
30° C-Core	1.53	0.02	1.54
30° Si-Core	1.52	0.028	1.55

以上の背景を踏まえ, 本研究では, 30° 転位に対する傾きに応じてキンクの密度が上昇してゆくことにより活性化エネルギーが低下し, 移動速度が加速してゆくと仮定した. 具体的には, 30° , 90° , 0° 転位に対して活性化エネルギーを設定し, その中間の成分を有する転位については上記の転位の活性化エネルギーを用いて直線補完を行う事により決定した. 本研究で仮定した各転位成分の活性化エネルギーを Table 14 に, 補完により作成した転位の成分と活性化エネルギーの関係を Fig. 41 に示す. 30° C(g)の活性化エネルギーについては反応経路計算と実験からの推測で値が大きく異なるが, 本研究では低い方の値である反応経路計算の値に基づいて決定した. ただし, これらの値は転位成分間の相対的な移動速度の関係を表現するためのものであるため, 定量的な正確性について本研究では検証していないことに注意されたい.

Table 14. Activation energy used in simulation

	0° (screw)	30°	90°
Si-Core	1.0	1.5	0.6
C-Core	1.0	1.5	0.7

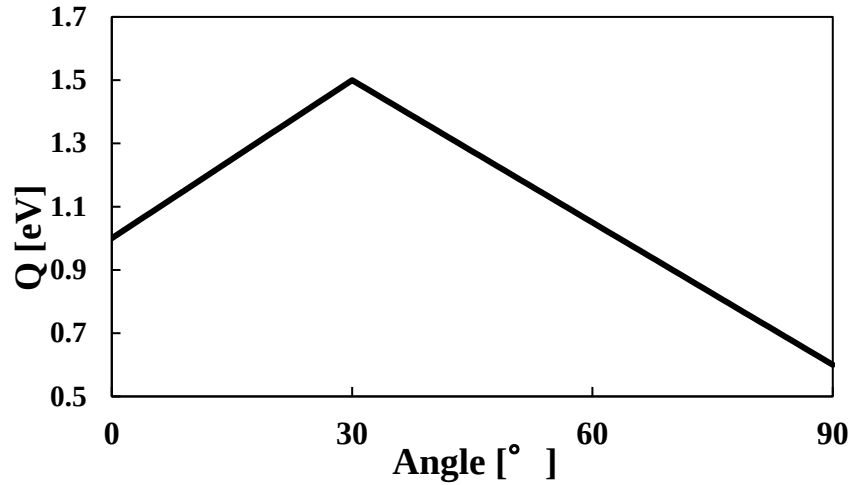


Fig. 41. Activation energy depending on angle between dislocation and burgers vector

2) REDG による効果

REDG による転位移動速度は 4.3 節に基づき以下の式で表す.

$$V = \frac{[\alpha\rho(I) - \gamma_{SF}]}{\tau_0 b} \cdot r(I) \exp\left(-\frac{Q - \Delta E}{k_B T}\right) \quad (4.8)$$

ΔE は REDG による活性化エネルギーの低下量で, 実験より $Q - \Delta E = 0.25 \text{ eV}$ 程度であることがわかっている [44]. $[\alpha\rho(I) - \gamma_{SF}]$ は実行的な積層欠陥エネルギーの変化に, $r(I)$ は純粋な REDG 効果による移動に対応している. これらの項の電流依存性に関する定量的な測定, 議論の結果はまだ確定してはいないため, さらなる議論が必要である.

応力の場合と同様に, 式(4.8)についても移動速度の方向性を考慮する必要がある. 積層欠陥エネルギーは転位の成分には依存しないため, 転位の成分により変化するパラメータは $r(I)$ もしくは活性化エネルギーとなる. 活性化エネルギーについては考慮が困難であること, 温度依存性を無視すると $r(I)$ の設定により内包可能であることから, 本研究では活性化エネルギーの値を, 30° Si(g) の値である 0.25 eV で一定とし, $r(I)$ について方向依存性があると仮定する.

4.3 節で述べた通り, REDG での移動が発生するのは転位芯が Si で構成されているものに限られる. そのため, 本研究では REDG では Si(g) 転位全てと, 一部に Si-Core が含まれると考えられる $0^\circ \sim 30^\circ \text{ C(g)}$ 転位のみが REDG の影響を受けると考える. REDG においても転位の活性化エネルギーが低いほど移動速度は早くなると考えられるため, 1)と同様の手法に基づき, 特徴的な量として 30° Si(g) , 90° Si(g) , 0° , 30° C(g) 転位の移動速度を設定し, その他の成分についてはこれらの移動速度を正弦関数により保管することにより決定した. 90° Si(g) , 0° 転位における $r(I)$ の値や 30° Si(g) に対する相対的な速度

は十分な議論がなされていないため定量的な決定はできないが、平野らの実験 [45, 46] において 6°Si(g) 転位の移動が観察されており、 30°Si(g) 転位に比べ移動速度は非常に速いことがわかっている。論文には明示されてはいないが、記載されている比較図に基づく 6°Si(g) 転位の移動速度は 30°Si(g) の 5~数十倍程度と予測される。本研究では 30°Si(g) の値を基準に 0° , 90°Si(g) 転位の移動速度がそれぞれ 10 倍, 50 倍となるように $r(I)$ を設定した。Fig. 42 に Si(g) 転位について本研究で設定した転位成分と移動速度の関係を示す。

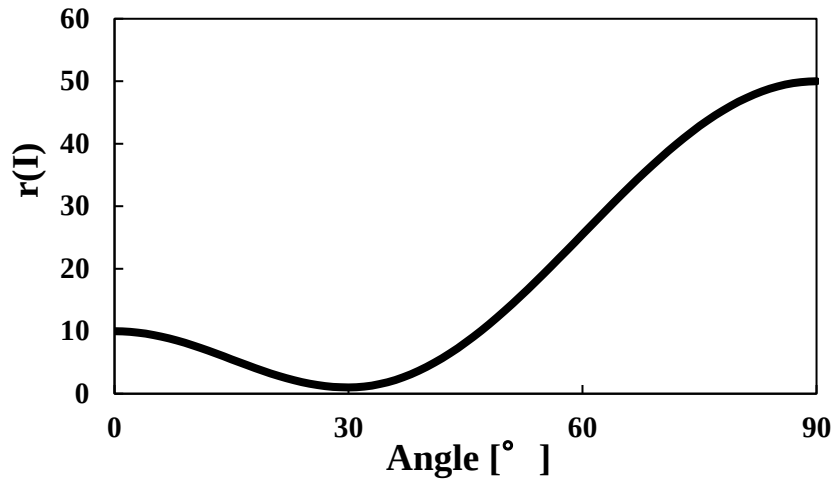


Fig. 42. Relative dislocation velocity depending on the angle between dislocation and burgers vector

以上より、本研究では以下の式を転位の移動式として用いる。バーガースベクトルと転位線のなす角を θ とする。

$$v = v_0 \left(\frac{\tau}{\tau_0} \right)^m \exp \left(\frac{-Q(\theta)}{k_B T} \right) + \frac{[\alpha \rho(I) - \gamma_{SF}]}{\tau_0 b} \cdot r(I, \theta) \exp \left(\frac{-(Q - \Delta E)}{k_B T} \right) \quad (4.9)$$

4.5.5 解析条件

本項では、以下の解析に共通する解析条件を説明する。各解析において別途明示がない場合には以下の条件の下解析を行った。本研究では、REDG により形成される積層欠陥の形状と初期状態の関係に主眼をおいているため、定量的な実験との比較が必要となる転位移動速度と電流量の関係には踏み込んでいない。また、REDG 時の積層欠陥エレルギーの値も明確ではないため、以下の設定はあくまで参考値であることに留意されたい。

Table 15. Condition of calculation

温度	100℃
応力場	$\sigma_{yz}=50\text{MPa}$ 他の成分は 0MPa
REDG 時の 30°Si(g) の移動速度	$70\mu\text{m/s}$
REDG 時の積層欠陥エネルギー	0.0153 J/m^2

4.6 三角欠陥への適用

4.6.1 エピ層中の基底面転位と三角欠陥

エピタキシャル成長層に進展した転位を起点とする三角欠陥については、多くの実験によりその起点が明確になっている [47, 48]. ウェーハのエピタキシャル成長時、ウェーハに存在する転位は鏡像力の影響で表面に垂直な方向を向くため、成長後にエピタキシャル成長層に存在する基底面転位の多くは表面、界面に対して垂直な方向を向いている。また、エピタキシャル成長は一般的に $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ 方向をステップフロー方向に行われるため Fig. 39(b)より、基底面転位の多くは完全らせん転位として存在する。完全らせん転位は 30°Si(g) と 30°C(g) へと分解するため、REDG 時には 30°Si(g) のみが移動し移動後の積層欠陥の形状は三角形となる。

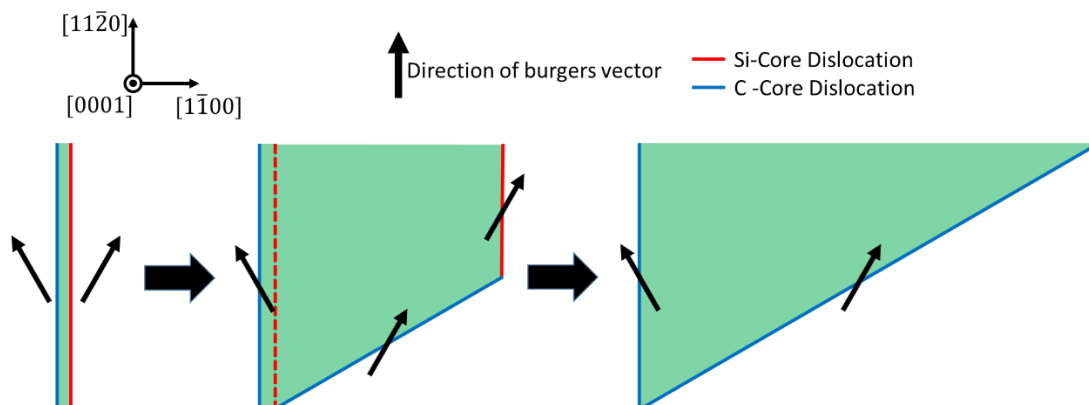


Fig. 43. Growth of triangle stacking fault from BPD in epitaxial layer

4.6.2 転位動力学計算結果

本シミュレーションで行った解析条件を以下に示す。すべり面は(0001)面であり、計算領域を $2\text{nm} \times 6\text{nm}$ である。エピタキシャル成長層中の(0001)面の大きさは実際には $100\mu\text{m} \times \text{数 mm}$ であるが、パイエルスポテンシャルにより転位の移動が阻害される低温の 4H-SiC では自己張力や転位間相互作用が転位移動に与える影響は非常に軽微である。

と考えられるため、小さい解析領域の大きさがシミュレーションに結果に与える影響は非常に軽微であると考えている。

拡大前の初期状態として、縦方向に完全らせん転位が分裂した形状である2本の 30° 転位を配置した。シミュレーション結果の図上では明示していないが、2本の転位に挟まれた領域には積層欠陥が存在しているとみなす。転位の上端はエピ層の表面に対応するため転位は自由に移動するが、下端ではエピ層/基板の界面において転位が固定されるため動かないものとした。本シミュレーションで導入した REDG の効果を確認するため、電流を印加していない状態での解析結果との比較を行う。

Fig. 44 に REDG 効果のない状態での応力のみによる転位移動の結果を、Fig. 45 に REDG 効果を組み込んだ状態での解析結果を示す。応力だけの効果では転位の移動が生じなかった一方で、REDG 効果を有効にした解析ではエピタキシャル成長層に存在する基底面転位を起点に、 30°Si(g) 転位のみが移動し2本の 30°C(g) 積層欠陥が形成される様子が確認できた。また、拡大中の形状についても、パリエルスの谷に沿った方向の 30° 転位が支配的であることが確認できた。



Fig. 44. Simulation result without REDG effect

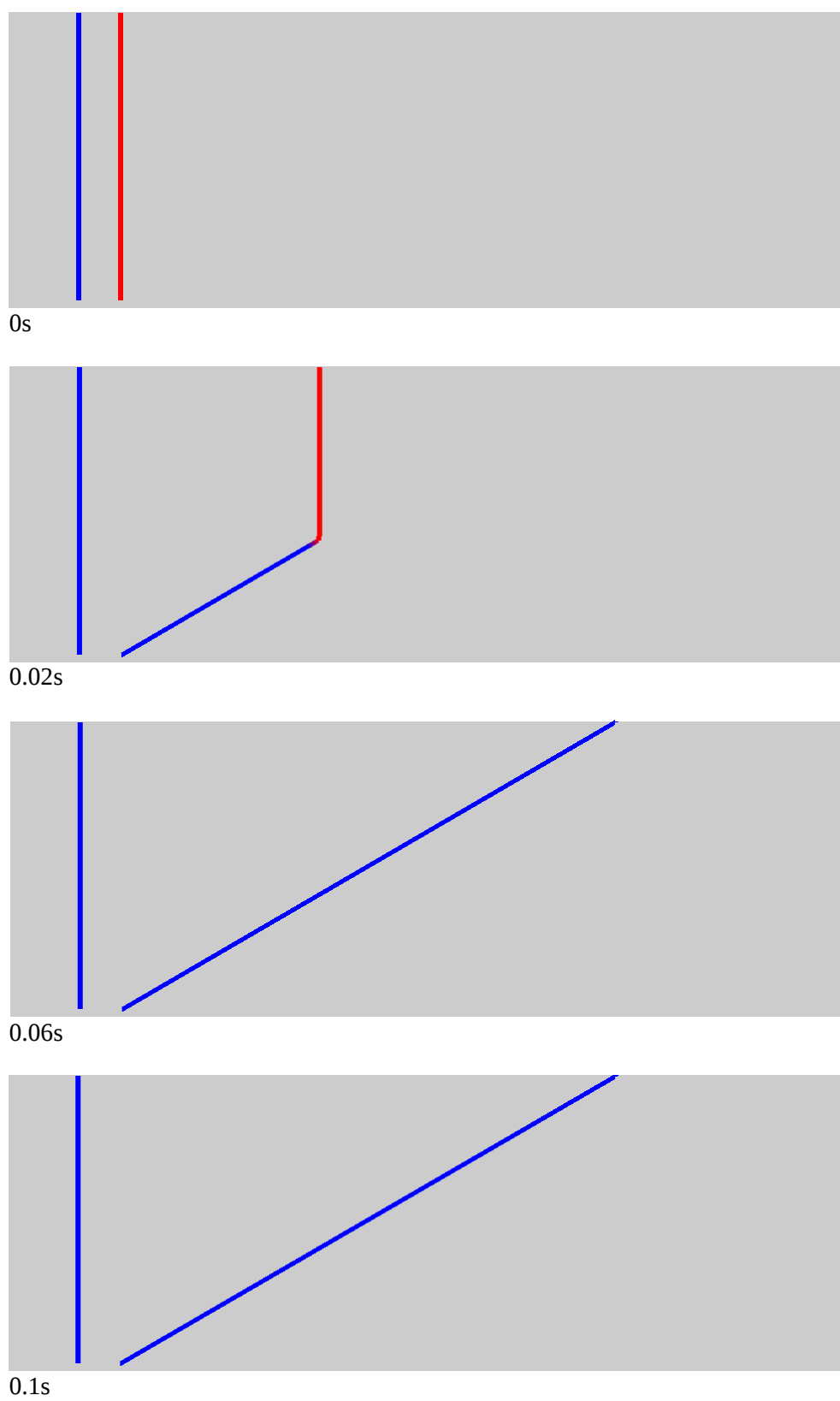


Fig. 45. Simulation result with REDG effect

4.6.3 分裂の種類の影響

基底面転位の分裂では，分裂するバーガースベクトルを入れ替える事により，2種類の分裂が考えられる．Fig. 43 の対となる分裂から考えられる積層欠陥形状について先行研究で考えられている形状 [47, 48]を示す．

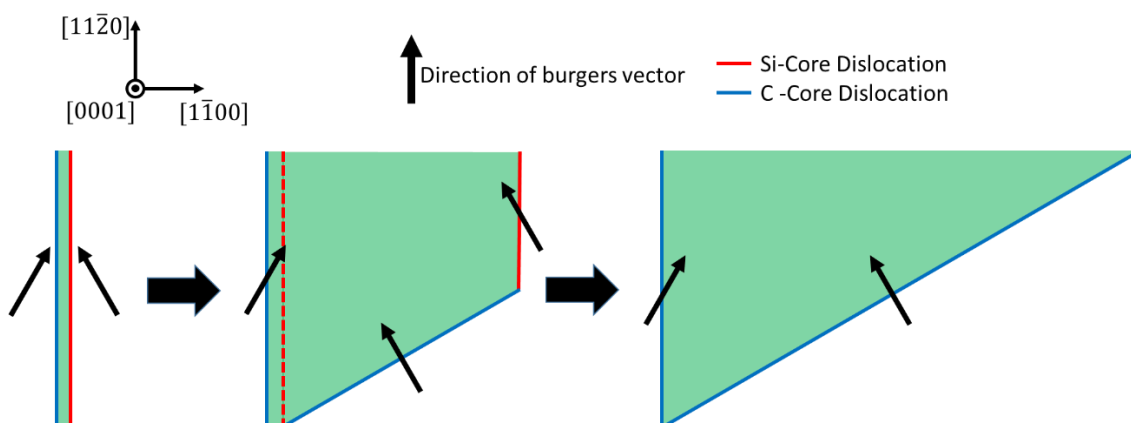


Fig. 46. Stacking fault expansion from BPD in epitaxial layer

この分裂モードについて，4.6.2 項と同様の計算条件で転位動力学解析を行った．Fig. 47 に示す通り，この解析では上の形状とは異なる結果となった．考えられる理由に $90^\circ\text{C}(\text{g})$ 転位の扱いがある．前述の通り $90^\circ\text{C}(\text{g})$ は活性化エネルギーが非常に低いため，REDG による移動の活性化が生じなくても非常に動きやすい状態にあると考えられる．そのため， $90^\circ\text{C}(\text{g})$ により転位の移動が停止するとは考えにくい．また，部分転位への分解のルールに従うと，該当の転位は $90^\circ\text{C}(\text{g})$ 転位ではなく $90^\circ\text{Si}(\text{g})$ になるはずである．これらの点において先行研究で示されたモデルとの差異が生じたと考えられる．本解析で観察された長方形の積層欠陥は先行研究でも確認されている [49, 48]．

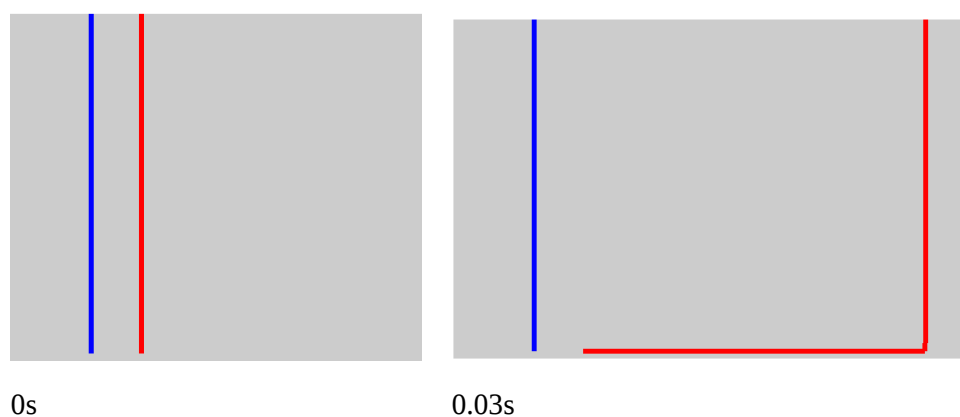


Fig. 47. Expansion of rectangular stacking fault

4.7 BPD-TED 変換点への適用

4.7.1 BPD-TED 変換点と積層欠陥

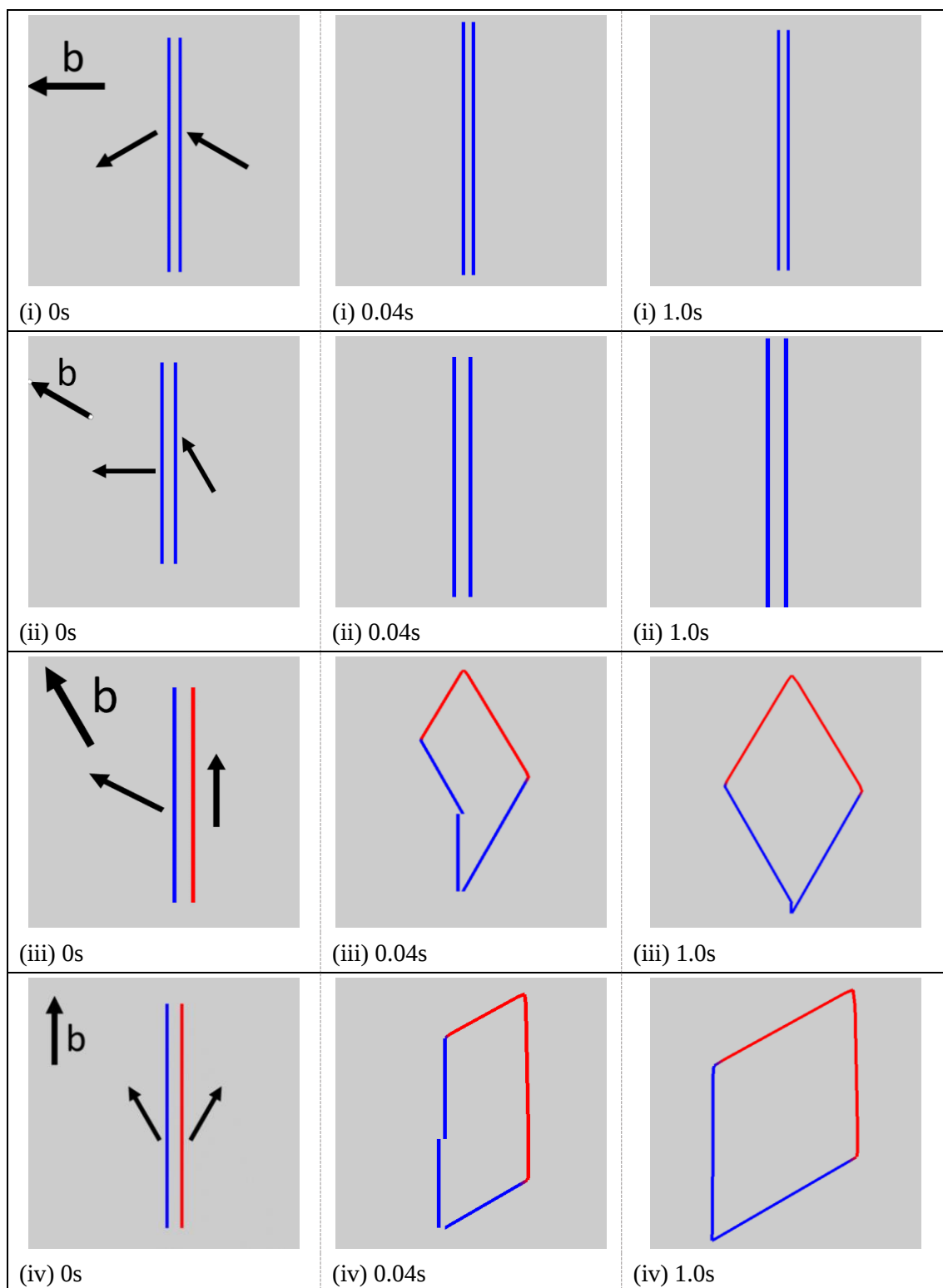
4.2.1 項で述べた通り，基板に存在する BPD の 95% は TD へと変換される．電流負荷が大きい状態では，エピ層/基板界面付近の BPD/TD 変換前の BPD を起点とする積層欠陥が報告されている [47, 50, 51] がその種類は多岐に渡るため，実験において網羅的に積層欠陥と起点の関係を求めることは困難である．また，拡張する電流密度にはしきい値が存在するが，しきい値と欠陥の状態の関係も明らかにはされていない．そのため，BPD/TD 変換点付近の短い BPD 成分を起点とする積層欠陥の形状と初期状態の関係を明確にし，状態の把握を容易にすることは今後のメカニズムの詳細な解明には重要である．

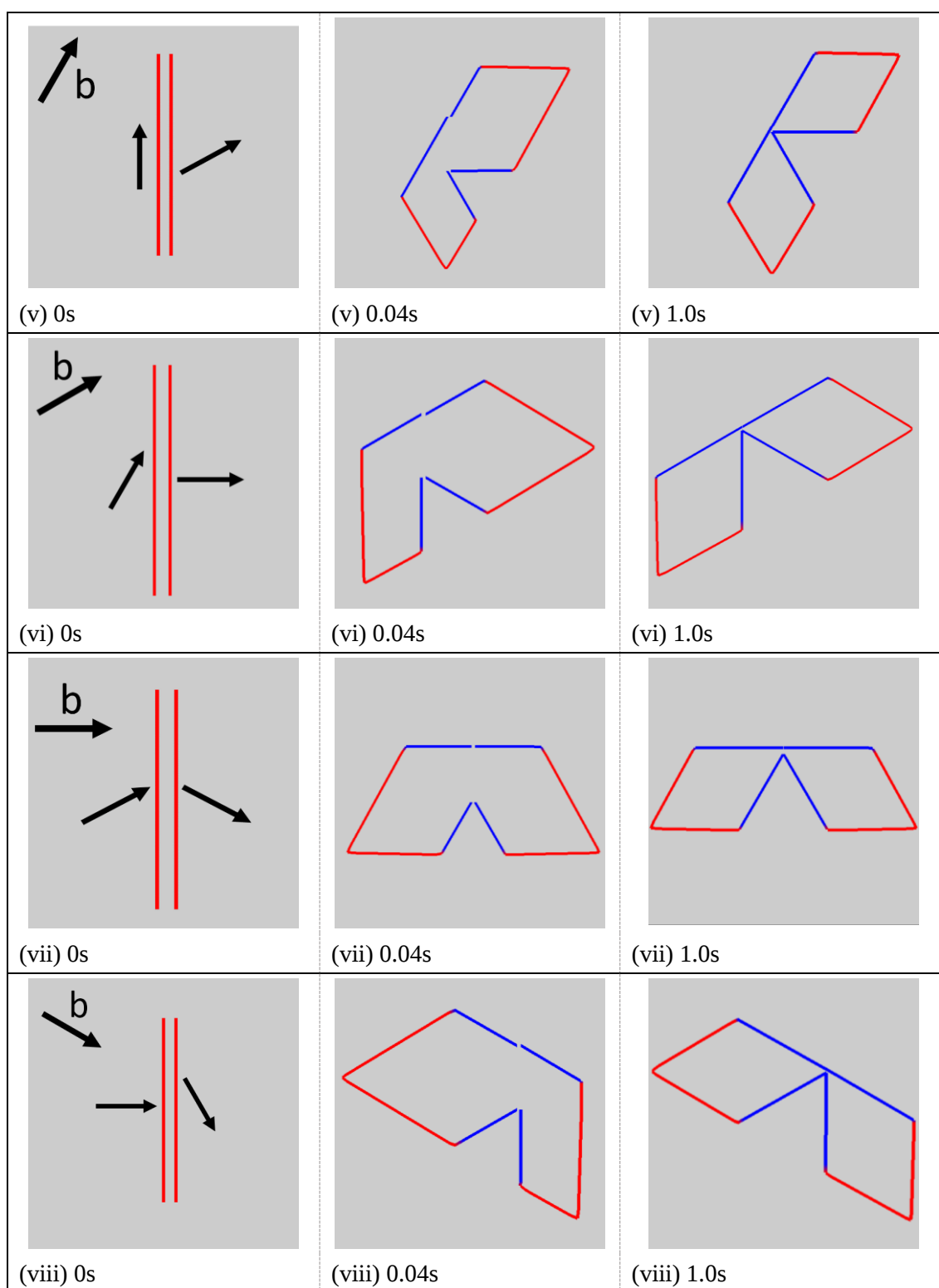
4.7.2 両端を固定された短い素片による積層欠陥形成

多岐に渡る積層欠陥形状とその起点の関係を整理する．BPD/TED 変換点付近では BPD は 2 つの変換点，もしくは変換点とエピ層/基板界面によって両端が固定されている．そこで本研究では，両端点固定された短い転位線を起点として解析を行い，形成される積層欠陥の形状について整理する．本解析では拡大後の形状を明確にするため，解析領域を十分に広い $300\mu\text{m} \times 300\mu\text{m}$ とし，領域の境界の影響が生じないように設定した．

計算を行う起点は，Fig. 39(b)の PD ループを元に，12 種類の初期配置を設定した．Fig. 48 に(i)~(xii)の 12 種の初期配置と拡大後の積層欠陥形状(0.04s, 1s)の関係を示す．初期の転位の長さは全て $3\mu\text{m}$ である．どの結果においてもパイエルス谷に沿った 30°Si(g) と C(g) 転位で構成された積層欠陥形状が再現された．(v)~(ix)の状態では，拡大初期の積層欠陥の大きさが比較的小さい状態では，初期配置に応じて 2 つの拡大ループの大きさの比率の変化が見られた．しかしながら，起点となる転位線が積層欠陥の大きさよりも十分小さい状態では形状の違いは見られなかった．安定な積層欠陥形状を形成するまでに必要となる素片の移動距離は初期の転位線の構造に依存する．一方で安定な形状を形成した後はどの素片も等速で動くため，積層欠陥の大きさに対する初期の転位線の相対的な長さが小さくなるにつれ 2 つのループの形状の差は小さくなってゆくと考えられる．また，十分拡大した後の積層欠陥の形状は，起点からバーガースベクトルと並行な方向に対頂点が

これらの解析で得られた積層欠陥形状は実験で確認されている形状 [52] と転位論により推測される初期配置の関数と一致することが確認できた．この結果より，本研究で導入した転位移動モデル，及び転位力学シミュレータは REDG により形成される積層欠陥を十分に表現できると考えられる．





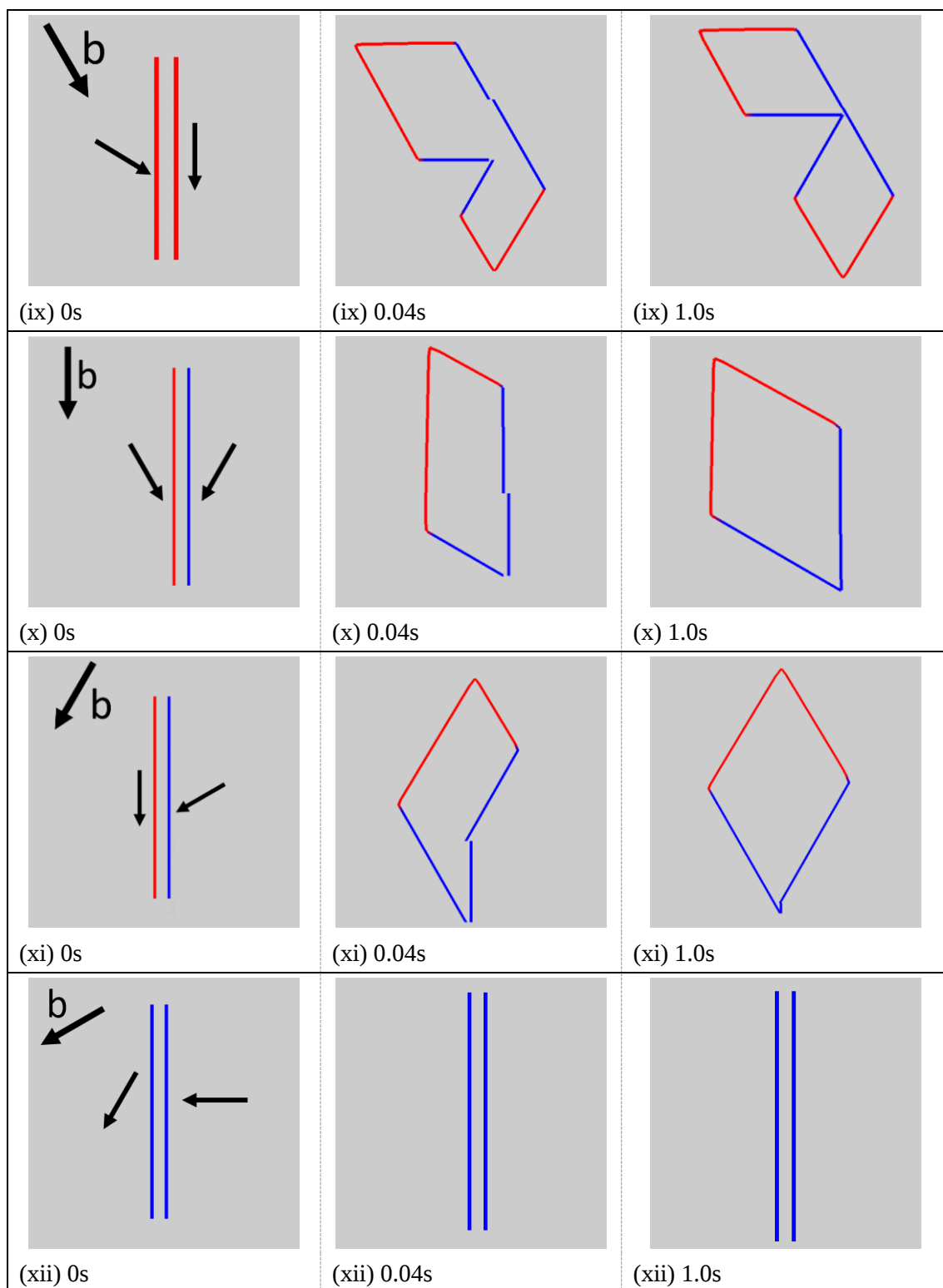


Fig. 48. Stacking fault expansion from BPD portion

4.7.3 実験との比較

前項の結果より，界面などの影響を考慮しない状態における積層欠陥形状が，転位論による予測や実験での観察結果と一致することが確認された．本項では pin ダイオードにおける，BPD/TD 変換前点を起点とすると考えられる積層欠陥形状について，シミュレーションを実施しその特徴について考察する．

比較対象とする実験は田中らにより実施された [47]ものとする．この実験では，多くの検討がなされてきたステップフローとバーガースベクトル方向が同一である $b=1/3[11\bar{2}0]$ 以外に， $b=1/3[1\bar{2}10]$ ， $1/3[2\bar{1}\bar{1}0]$ を有する基底面転位から形成された積層欠陥の起点について考察している．Fig. 49 に観察された積層欠陥形状と考えられる起点の模式図を示す．a 点に存在する BPD/TED 変換点を起点に (b) に示すような積層欠陥が拡大し，abc を頂点とする三角欠陥 adef を頂点とする四角形の欠陥が形成されたと考えられる．以降では，本実験に対応した解析を行い，実験で予測された初期形状と拡大後の形状について考察を行う．

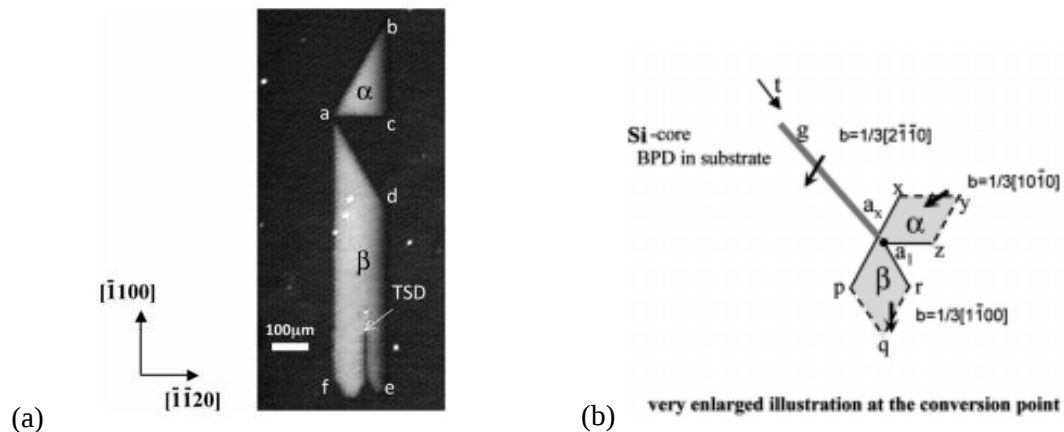


Fig. 49. Observed shape and proposed model of stacking fault expansion [47]

解析領域として $10\mu\text{m}\times 200\mu\text{m}$ の領域を設定した．領域下端より $0.1\mu\text{m}$ の点を中心に Fig. 50 に示すような基底面転位起点として設定し解析を行った．Fig. 51 に積層欠陥が拡大する様子を示す．拡大初期段階では， 30° C(g)， 30° Si(g) 転位，基板/エピ層界面に伸びる転位により構成される三角形状が確認された．積層欠陥が表面に達すると，表面に到達した転位が急激に動き平行四辺形の帯状欠陥が形成された．今回の解析では自由表面による鏡像力の効果は導入していないため，この転位線の急激な移動は転位線が表面に達し途切れたことにより，張力が失われたためと考えられる．しかしながら，この加速現象については実験では確認されていないため，シミュレーションに課題が存在していると考えられる．本研究で表面に達した転位の移動については検討対象としておらず

十分な検証を行っていないため、今後はこのような点を含め実験とシミュレーションにの双方から現象の確認を行う必要がある。

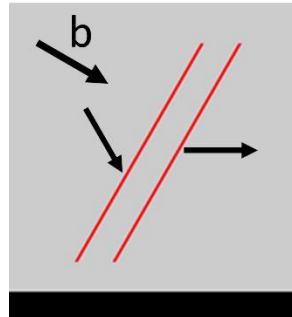
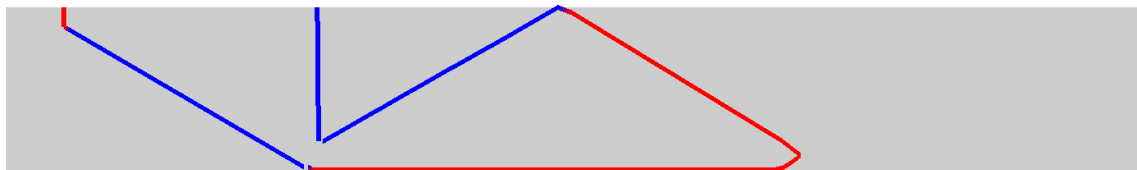


Fig. 50. Initial state of Dislocation



(a) 0.07s



(b) 0.23s



(c) 0.235s



(d) 0.26s

Fig. 51 Expansion shapes of stacking fault

4.8 結言

本研究では, パイエルスポテンシャルの影響により生じる転位の配向性及び REDG の影響を考慮した転位移動モデルを転位動力学シミュレータに組み込むことにより 4H-SiC バイポーラデバイスに電流を印加した場合の転位, 積層欠陥形状の再現を行った. シミュレータにより得られた解析結果と理論, 実験の観察結果を比較することにより, 本研究で作成したシミュレータの定性的な妥当性を確認した.

第5章 結言

本研究では、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の算出、有限要素法によるデバイス内部の残留応力評価を行うことにより、ラマン分光測定による測定実験結果との比較検証が可能な応力解析技術の開発を行った。また、パイエルスポテンシャルの影響により生じる転位の配向性を考慮した転位移動モデルを転位動力学シミュレータに組み込むことにより、REDG の移動メカニズム解明のために必要となる低温 4H-SiC における転位、積層欠陥形状の再現を行った。

第一原理計算を用いた 4H-SiC のフォノン変形ポテンシャル係数の算出では、一軸等方応力条件での解析結果を用いて算出した結果が、他の応力状態においても一定の妥当性を有することが確認された。一方で、応力が高い状態ではシミュレーション条件に依存すると考えられる理論と解析結果の乖離が見られた。算出したフォノン変形ポテンシャル係数にあたる影響は軽微であると考えられるが、理論式が高応力条件下でも適用可能であるかの検証も必要となるため計算さらなる高精度化が今後の課題となる。

有限要素法によるデバイス内部の残留応力評価では SiC 基板に作成された熱酸化膜のヤング率、線膨張係数の測定、各プロセスで生じる真性応力を見積もることにより、より高精度な応力解析を行った。得られた応力分布を第一原理計算で算出したフォノン変形ポテンシャル係数によりラマンシフト分布へと変換しラマン分光測定結果と組み合わせることにより、得られた応力分布が定性的に妥当であることを確認した。本研究では製造プロセスが非公開のデバイスについて解析を行い、また見積もられる各真性応力にも多分に予測を含むため、定量的に高精度な解析を行い本手法の妥当性を確認するためには製造プロセスが明確なデバイスについて、各段階で生じる真性応力を適宜測定した上で解析を実施することが求められる。

また、低温 4H-SiC における転位、積層欠陥形状を再現可能な転位動力学解析技術の開発では、共有結合の強い 4H-SiC における転位移動の微視的なモデル及び REDG の基礎的な移動メカニズムを基礎に、計算に多大な負荷をかけることなく移動予測をおこなう転位動力学シミュレータを開発した。作成したシミュレータにより得られた積層欠陥の形状が実験や転位論により得られる結果と一致することを確認した。一方、本研究では移動の速度の定量的な評価は行えていない。電流、応力の影響を考慮して解析を行い本現象のメカニズムを解明してゆくためにはそれぞれの影響の大きさについて定量的な妥当性確認が必要不可欠であるため、今後実験、原子スケールでの計算など別の手法との組み合わせを通じて本解析の高精度化に取り組んでゆく必要がある。

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] M. Yashikawa, K. Kosaka, H. Seki and T. Kimoto, "Stress Characterization of 4H-SiC Metal–Oxide–Semiconductor Field-Effect Transistor (MOSFET) using Raman Spectroscopy and the Finite Element Method," *Applied Spectroscopy*, vol. 70, no. 7, pp. 1209-13, 2016.
- [3] R. J. Briggs and A. K. Ramdas, "Piezospectroscopic study of the Raman spectrum of cadmium sulfide," *PHYSICAL REVIEW B*, vol. 13, no. 12, pp. 5518-5528, 1976.
- [4] 村上陽一, “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,” 東京大学修士学位論文, 2016.
- [5] M. Skowronski and S. Ha, "Degradation of hexagonal silicon-carbide-based bipolar devices," *Journal of Applied Physics*, vol. 99, no. 1, p. 011101, 2006.
- [6] K. Maeda, "Recombination-enhanced dislocation glides - the current status of knowledge," *Materials Research Society Symposium Proceedings*, vol. 1195, pp. 57-68, 2010.
- [7] 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," *PHYSICAL REVIEW*, vol. 173, no. 3, 1968.
- [8] S. Nakashima and H. Harima, "Raman Investigation of SiC polytypes," *physica status solidi (a)*, vol. 162, no. 39, 1997.
- [9] 杉江隆一, 内田智之, 小坂賢一, 遠藤亮, “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,” 第 34 回ナノテストングシンポジウム, pp. 47-52, 2014.
- [10] [Online]. Available: <https://azuma.nims.go.jp>.
- [11] 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," *Journal of Applied Physics*, vol. 82, no. 6, p. 3152, 1997.
- [12] H. Harima, S. Nakashima and T. Uemura, "Raman scattering anisotropic LO-phonon-plasmon-coupled mode in n-type 4H- and 6H-SiC," *Journal of Applied Physics*, vol. 78, no. 3, 1995.
- [13] D. Olego, M. Cardona and P. Vogl, "Pressure dependence of the optical phonons and transverse effective charge in 3C-SiC," *Physical Review B*, vol. 82, no. 6, p. 3152, 1982.

- [14] N. Sugiyama, M. Yamada, Y. Urakami, M. Kobayashi, T. Masuda, K. Nishikawa, F. Hirose and S. Onda, "Correlation of Stress in Silicon Carbide Crystal and Frequency Shift in Micro-Raman Spectroscopy," *Materials Research Society Symposium Proceedings*, vol. 1693, 2014.
- [15] M. J. Liu, "Simple technique for measurements of pulsed Gaussian-beam spot sizes," *Optics Letters*, vol. 7, no. 5, p. 3152, 1982.
- [16] 泉聡志 , 酒井信介, 実践有限要素法シミュレーション, 2013.
- [17] J.-H. Zhao, T. Ryan, P. S. Ho, A. J. McKerrow and W.-Y. Shih, "Measurement of elastic modulus, Poisson ratio, and coefficient of thermal expansion of on-wafer submicron films," *Journal of Applied Physics*, vol. 85, no. 9, 1998.
- [18] A. K. Sinha, H. J. Levinstein and T. E. Smith, "Thermal stresses and cracking resistance of dielectric films (SiN, Si₃N₄, and SiO₂) on," *Journal of applied physics*, vol. 49, no. 4, 1978.
- [19] Z. Li and R. C. Bradt, "Thermal expansion and thermal expansion anisotropy of SiC polytypes," *Journal of the American Ceramic Society*, vol. 70, no. 7, 1987.
- [20] L. B. Freund and S. Suresh, "Thin film materials," in *Thin Film Materials*, 2003, pp. 94 - 96.
- [21] 日本機械学会, 伝熱工学資料, 2009.
- [22] 三浦 英生 , 清水博文他(編), “トランジスタ特性の応力・歪み依存性,” *最新シリコンデバイスと結晶技術*, pp. 59 - 61, 2005.
- [23] 島津ひろみ , 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,” *日本機械学会論文集(A 編)*, 第 巻 64, 第 618, p. 327, 1998.
- [24] M. Maeda and K. Ikeda, "Stress evaluation of radio-frequency-biased plasma-enhanced chemical vapor deposited silicon nitride films," *Journal of Applied Physics*, vol. 83, no. 7, 1998.
- [25] 三宅 威生, “転位動力学シミュレータの開発と半導体構造に対する適用,” *東京大学修士学位論文*, 2004.
- [26] S. Ha, M. Skowronski and H. Lendenmann, "Nucleation sites of recombination-enhanced stacking fault formation in silicon carbide p-i-n diodes," *Journal of Applied physics*, vol. 96, no. 1, 2004.
- [27] S. I. Maximenko and T. S. Sudarshan, "Stacking fault nucleation sites in diffused 4H-SiC p-i-n diodes," *Journal of Applied Physics*, vol. 97, p. 074501, 2005.
- [28] 須. 淳. 木本 恒暢, “高耐圧パワーデバイス応用を目指した SiC のエピタキシャル成長と欠陥制御,” *Journal of the Vacuum Society of Japan*, 第 巻 54, 第 6, 2011.

- [29] A. Galeckas, J. Linnros and P. Pirouz, "Recombination-enhanced extension of stacking faults in 4H-SiC p-i-n diodes under forward bias," *Applied Physics Letters*, vol. 81, no. 5, 2002.
- [30] S. Ha, M. Skowronski, J. J. Sumakeris, M. J. Paisley and M. K. Das, "Driving Force of Stacking-Fault Formation in SiC p-i-n Diodes," *Physics Review Letter*, vol. 92, p. 175504, 2004.
- [31] M. H. Hong, A. V. Samant and P. Pirouz, "Stacking fault energy of 6H-SiC and 4H-SiC single crystals," *Philosophical Magazine A*, vol. 80, no. 4, p. 919, 2000.
- [32] T. Tawara, T. Miyazawa, M. Ryo, M. Miyazato, T. Fujimoto, K. Takenaka, S. Matsunaga, M. Miyajima, A. Otsuki, Y. Yonezawa, T. Kato, H. Okumura, T. Kimoto and H. Tsuchida, "Short minority carrier lifetimes in highly nitrogen-doped 4H-SiC epilayers for suppression of the stacking fault formation in PiN diodes," *Journal of Applied Physics*, vol. 120, p. 115101, 2016.
- [33] A. Moulin, M. Condat and L. P. Kubin, "Perfect and partial Frank-Read sources in silicon: A simulation," *Philosophical Magazine A*, vol. 79, no. 8, p. 1995, 1999.
- [34] N. M. Ghoniem, S.-H. Tong and L. Z. Sun, "Parametric dislocation dynamics: A thermodynamics-based approach to investigations of mesoscopic plastic deformation," *Physical Review B*, vol. 61, no. 2, p. 913, 2000.
- [35] 小林尚司, “転位動力学シミュレータの開発とシリコンの転位発生・成長過程への適用,” 東京大学大学院修士学位論文, 2008.
- [36] K. W. Schwarz, "Simulation of dislocation on the mesoscopic scale I. Methods and examples," *Journal of Applied Physics*, vol. 85, no. 1, 1999.
- [37] H. M. Zbib, T. Díaz de la Rubia, M. Rhee and J. P. Hirth, "3D dislocation dynamics: stress-strain behavior and hardening mechanisms in fcc and bcc metals," *Journal of Nuclear Materials*, vol. 276, p. 154, 2000.
- [38] H. M. Zbib, M. Rhee and J. P. Hirth, "On plastic deformation and the dynamics of 3D dislocations," *International Journal of Mechanical Sciences*, vol. 40, no. 2-3, p. 113, 1998.
- [39] H. Idrissi, M. Lancin, G. Regula and B. Pichaud, "Study of Dislocation Mobility in 4H SiC by X-Ray Transmission Topography, Chemical Etching and Transmission Electron Microscopy," *Materials Science Forum*, Vols. 457-460, pp. 355-358, 2004.
- [40] H. Idrissi, G. Regula, M. Lancin, J. Douin and B. Pichaud, "Study of Shockley partial dislocation mobility in highly N-doped 4H-SiC by cantilever bending," *physica status solidi (c)*, vol. 2, no. 6, p. 1998, 2005.

- [41] P. Pirouz and M. Zhang, "Yield and fracture properties of the wide band-gap semiconductor 4H-SiC," *Journal of Applied Physics*, vol. 93, no. 6, 2003.
- [42] J. P. Hirth, J. Lothe, THEORY OF DISLOCATIONS Second Edition, New York: Wiley, 1982.
- [43] 楊晶, "Reaction Pathway Analysis for the Mobility of Partial Dislocation in 3C-SiC and Shuffle-set Perfect Dislocation in Silicon," 東京大学博士学位論文, 2016.
- [44] A. Galeckas, J. Linnros and P. Pirouz, "Recombination-Induced Stacking Faults: Evidence for a General Mechanism in Hexagonal SiC," *Physical Review Letters*, vol. 96, p. 025502, 2006.
- [45] 平野梨伊, "4H-SiC 中の転位のフォトルミネッセンス解析," 慶應義塾大学博士学位論文, 2013.
- [46] R. Hirano, H. Tsuchida, M. Tajima, K. M. Itoh and K. Maeda, "Polarization of Photoluminescence from Partial Dislocations in 4H-SiC," *Applied Physics Express*, vol. 6, 2013.
- [47] A. Tanaka, H. Matsuhata, N. Kawabata, D. Mori, K. Inoue, M. Ryo, T. Fujimoto, T. Tawara, M. Miyazato, M. Miyajima, K. Fukuda, A. Ohtsuki, T. Kato, H. Tsuchida, Y. Yonezawa and T. Kimoto, "Growth of Shockley type stacking faults upon forward degradation in 4H-SiC p-i-n diodes," *Journal of Applied Physics*, vol. 119, p. 095711, 2016.
- [48] H. Jacobson, J. P. Bergman, C. Hallin, E. Janzén, T. Tuomi and H. Lendenmann, "Properties and origins of different stacking faults that cause degradation in SiC PiN," *Journal of Applied Physics*, vol. 95, no. 3, 2004.
- [49] S. Ha, M. Benamara, M. Skowronski and H. Lendenmann, "Core structure and properties of partial dislocations in silicon carbide p-i-n diodes," *Applied Physics Letters*, vol. 83, no. 24, 2003.
- [50] N. A. Mahadik, R. E. Stahlbush, M. G. Ancona, E. A. Lmhoff, K. D. Hobart, R. L. Myers-Ward, C. R. Eddy Jr., D. K. Gaskill and K. F. J., "Observation of stacking faults from basal plane dislocations in highly doped 4H-SiC epilayers," *Applied Physics Letters*, vol. 100, p. 042102, 2012.
- [51] K. Konishi, S. Yamamoto, S. Nakata, Y. Nakamura, Y. Nakanishi, T. Tanaka, Y. Mitani, N. Tomita, Y. Toyoda and S. Yamakawa, "Stacking fault expansion from basal plane dislocations converted into threading edge dislocations in 4H-SiC epilayers under high current stress," *Journal of Applied Physics*, vol. 114, p. 014504, 2013.

- [52] 飯島彬文, 須田淳, 木本恒暢, “4H-SiC エピタキシャル層中におけるショックレ一型積層欠陥と基底面転位構造の関係,” 第77回応用物理学会秋季学術講演会講演予稿集, pp. 15p-C302-9, 2016.
- [53] X. Zhang and M. Skowronski, "Glide and multiplication of basal plane dislocations during 4H-SiC homoepitaxy," *Journal of Applied Physics*, vol. 102, p. 093520, 2007.
- [54] L. KUBIN, dislocations, mesoscale simulations and plastic flow, Oxford: OXFORD UNIVERSITY PRESS, 2013.

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の修士学位論文として作成したものです。指導教員の泉聡志教授には研究に関連して様々な面からご指導をいただきました。研究に直接は関係しないような事柄でも非常にためになるお話が多く、先生のご指導を仰げて本当に良かったと思っております。また、酒井信介教授、波田野明日可助教には研究会などの場面で鋭いご指摘をいただき、自分だけでは気づけなかったであろう様々な点を発見する事ができました。

株式会社東芝の廣畑様、牛流様には実験、シミュレーション等研究に関連する様々な点でご協力頂きました。ありがとうございました。

博士課程の高本さんには研究内容について多くの相談をさせていただき、お話をしているうちに見えるものが増える体験を何度もさせていただきました。普段の雑談から進路の話までいろいろと糧になるお話が聞けたと思います。感謝しています。

個別に書くことはしませんが、同期を初めとする研究室のメンバーには本当に感謝しています。楽しく過ごしながらも、見習うべき点も多く自覚させられました。ありがとうございました。

以上

修士論文

平成 29 年 2 月 提出

指導教員 泉 聡志 教授

37-156201 榊間大輝