

博士論文

4H-SiC パワーデバイスの信頼性設計のため
の力学・電気特性解析手法の開発

榊間 大輝

目次

目次.....	1
図目次.....	5
表目次.....	8
第1章 序論.....	9
1.1. 研究背景.....	9
1.1.1. 4H-SiC パワーデバイス.....	9
1.1.2. 信頼性設計における課題.....	11
1.2. 研究目的.....	12
1.3. 論文の構成.....	14
本章の参考文献.....	15
第2章 4H-SiC の結晶構造と順方向劣化現象および関連手法.....	17
2.1. 緒言.....	17
2.2. 4H-SiC の結晶構造.....	17
2.3. 4H-SiC の転位と積層欠陥.....	18
2.3.1. 4H-SiC の転位と BPD/TED 変換.....	18
2.3.2. 基底面転位の分裂.....	19
2.4. 順方向劣化現象と積層欠陥の拡大.....	22
2.4.1. 順方向劣化現象.....	22
2.4.2. 転位の移動.....	23
① 転位移動の活性化エネルギー.....	23
② 転位移動前後のエネルギー変化：転位移動の駆動力.....	24
2.4.3. 転位移動の活性化 (REDG).....	25
2.4.4. 積層欠陥拡大の駆動力.....	26
① 電気的なエネルギーの変化による解釈と提案されているモデル.....	26
② QWA と転位論に基づく積層欠陥拡大の駆動力のモデル化.....	28
③ 提案されている対策 (再結合促進層).....	30
2.5. ラマン分光法による半導体の応力解析.....	30
2.5.1. ラマン分光法の基礎概念.....	30
2.5.2. ラマン分光法を用いた半導体の応力分布の測定.....	32
2.6. デバイスシミュレーション.....	33

本章の参考文献	34
第3章 第一原理計算を用いたフォノン変形ポテンシャルの決定.....	39
3.1. 緒言.....	39
3.2. 計算手法.....	39
3.3. 結果と考察	41
3.3.1. 解析結果	41
3.3.2. 妥当性の確認	45
3.4. 本章のまとめ	47
本章の参考文献	47
第4章 ラマン分光法と FEM 解析による 4H-SiC デバイスの応力解析手法の開発.....	48
4.1. 緒言.....	48
4.2. 計算手法.....	49
4.2.1. デバイス構造と製造プロセス	49
4.2.2. 材料定数と真性応力の測定	50
4.2.3. ラマン分光測定	52
4.2.4. FEM 解析	52
① FEM 解析モデル	52
② 多段階熱応力解析	53
4.2.5. 応力分布のラマン線シフト分布への変換.....	55
4.3. 結果と考察	58
4.3.1. 材料特性と真性応力	58
4.3.2. FEM 解析結果とラマン分光測定結果の比較.....	58
4.3.3. 応力分布	59
① 垂直応力	59
② 基底面内のせん断応力	61
③ 分解せん断応力	62
4.4. SiC-MOSFET への適用	63
4.4.1. SiC-MOSFET の製造プロセスの推定.....	63
① SiC 基板の作成	63
② ゲートの作成	65
③ 層間絶縁膜	65
④ コンタクトメタル, 電極パッド	65
4.4.2. 解析条件	65
4.4.3. 解析結果	67
4.5. 本章のまとめ	69
本章の参考文献	69

第 5 章	積層欠陥エネルギーの温度依存性の推定.....	71
5.1.	緒言.....	71
5.2.	計算手法.....	72
5.2.1.	調和振動近似.....	72
5.2.2.	擬調和振動近似.....	74
5.3.	結果と考察.....	74
5.3.1.	フォノンが積層欠陥エネルギーへ与える影響：調和振動近似.....	74
5.3.2.	積層欠陥エネルギーに熱膨張が与える影響：擬調和振動近似.....	79
5.4.	得られた積層欠陥エネルギーの積層欠陥拡大/縮小への適用.....	81
5.4.1.	順方向劣化.....	81
5.4.2.	DSSF の自発的拡大.....	82
5.5.	本章のまとめ.....	84
	本章の参考文献.....	84
第 6 章	順方向劣化現象における臨界少数キャリア密度の応力依存性.....	86
6.1.	緒言.....	86
6.2.	臨界少数キャリア密度の応力依存性の理論モデル.....	86
6.3.	実験 ² と解析の概要.....	87
6.4.	FEM 解析.....	89
6.4.1.	サブモデリング解析の概要.....	89
6.4.2.	全体解析モデル.....	90
6.4.3.	中間解析モデル.....	92
6.4.4.	詳細解析モデル.....	93
6.5.	デバイスシミュレーション.....	94
6.5.1.	4H-SiC に対応したシミュレータの構築.....	94
①	ドーパント濃度と自由キャリア密度の関係.....	94
②	移動度.....	95
③	キャリア寿命.....	96
④	バンドギャップの変化.....	97
6.5.2.	解析条件.....	98
6.6.	結果と考察.....	99
6.6.1.	FEM 解析.....	99
6.6.2.	デバイスシミュレーションの妥当性確認.....	102
6.6.3.	分解せん断応力が臨界少数キャリア密度へ与える影響.....	104
6.7.	本章のまとめ.....	106
	本章の参考文献.....	107
第 7 章	結言.....	109

7.1. 結論.....	109
7.2. 展望.....	111
付録：LDA と GGA の比較	112
A.1. 密度汎関数法	112
A.2. LDA と GGA の比較: 4H-SiC の場合	113
謝辞.....	116
研究業績.....	117

图目录

Fig. 1.1. Electric field distribution in a pin diode at the same reverse voltage.....	10
Fig. 1.2. Interaction of electrical properties, temperature, and mechanical stress.....	11
Fig. 1.3. Flowchart of this thesis.	14
Fig. 2.1. Typical polytype structures of SiC crystals.....	17
Fig. 2.2. Schematic diagram of the BPD/TED conversion.	18
Fig. 2.3. Schematic illustration of dissociation of perfect BPD.....	19
Fig. 2.4. Schematic diagrams of stacking sequences of (a) perfect 4H-SiC crystal, crystals with (b) single SSSF(3, 1), (c) SSSF(1, 3), and (d) DSSF.	20
Fig. 2.5. Schematic illustrations of two different dissociated PD loops.	21
Fig. 2.6. The schematic diagram of the expansion of a stacking fault.	21
Fig. 2.7. Schematic illustrations of the shape and the origin of a (a) triangle-shaped stacking fault and a (b) bar-shaped stacking fault in a SiC pin diode.....	22
Fig. 2.8 Schematic of Rearrangement of bonds during dislocations movement.	23
Fig. 2.9. Energy diagram of dislocation movement	24
Fig. 2.10. A simple quantum-well energy band structure for the region containing a stacking fault.	26
Fig. 2.11. Schematic diagram of carrier trapping due to quantum well of stacking fault.....	27
Fig. 2.12. Schematic diagram of energy level change when dislocations move over one Peierls barrier.	29
Fig. 2.13. The basic framework of the device simulation.	34
Fig. 3.1. Schematic illustrations of the atomic movements in each phonon mode.....	40
Fig. 3.2. Schematics of 4H-SiC unit cell.....	41
Fig. 3.3. Dependence of frequency shifts on biaxial isotropic stress on the basal plane.	43
Fig. 3.4. Dependence of frequency shifts on uniaxial stress σ_{zz}	43
Fig. 3.5. (a) Dependence of the frequency shifts on the shear stress τ_{xy} and (b) relationship between absolute values of both.....	44
Fig. 4.1. The basic framework of the stress analysis via FEM and micro-Raman Spectroscopy.	48
Fig. 4.2. Structure of the 4H-SiC pin diode used in this study.....	50
Fig. 4.3. Schematic illustrations of the creation process of the pin diode.	51

Fig. 4.4. Measurement area of micro-Raman spectroscopy.....	53
Fig. 4.5. 1/4 FEM analysis model.....	53
Fig. 4.6. Schematic illustrations of analysis model (a) before and (b) after formation of SiO ₂ film.	54
Fig. 4.7. Schematic illustrations of the analysis steps of SiO ₂ film formation.....	54
Fig. 4.8. Distribution of σ_{xx} at (a) analysis step 1.5 (600 °C) and (b) analysis step 2 (800 °C).	55
Fig. 4.9. Relationship between measured vibration mode and crystal orientation when measuring TO mode.	57
Fig. 4.10. Frequency shift distribution of E ₂ mode obtained by (a) Raman spectroscopy measurement and (b) stress analysis.....	58
Fig. 4.11. Distributions of (a) σ_{xx} , (b) σ_{yy} , and (c) σ_{zz} on plane A.	59
Fig. 4.12. Distributions of (a) σ_{xx} , (b) σ_{yy} , and (c) σ_{zz} on plane B.....	60
Fig. 4.13. (a) σ_{xx} , (b) σ_{yy} , and (c) σ_{zz} along the line AA'.....	60
Fig. 4.14. Distributions of shear stress $\tau_{x'y'}$ in the basal plane at (a) plane A and (b) SiC/electrode interface.....	61
Fig. 4.15. Resolved shear stress along line BB'.....	62
Fig. 4.16. Distribution of resolved shear stress τ_{rss} , [1100] on plane B.	63
Fig. 4.17. FEM analysis model of SiC-MOSFET.	66
Fig. 4.18. Measurement area of Raman spectroscopy to SiC-MOSFET.	67
Fig. 4.19. Frequency shift distribution of E ₂ mode obtained by (a) Raman spectroscopy measurement and (b) stress analysis.....	68
Fig. 4.20. Distributions of (a) σ_{xx} , (b) σ_{yy} , and (c) σ_{zz} near the electrode.....	68
Fig. 5.1. 4H-SiC unit cell structures of (a) a perfect crystal and crystals with (b) SSSF(3, 1), (c) SSSF(1, 3), and (d) DSSF.	73
Fig. 5.2. Stacking sequences of (a) perfect crystal of 4H-SiC, crystals with (b) SSSF(3, 1), (c) SSSF(1, 3) and (d) DSSF.	75
Fig. 5.3. The dependence of stacking fault energy on temperature calculated with harmonic approximation.....	76
Fig. 5.4. Phonon dispersion curves of 4H-SiC.....	77
Fig. 5.5. Phonon dispersion curves obtained with (a) $2 \times 2 \times 1$, (b) $3 \times 3 \times 1$, and (c) $4 \times 4 \times 1$ supercells.....	78
Fig. 5.6. The phonon DOS of 4H-SiC with a perfect crystal and crystals with stacking faults.	79
Fig. 5.7. Temperature-dependent thermal expansion coefficients obtained in this study.	80
Fig. 5.8. The dependence of stacking fault energy on temperature obtained with the quasi- harmonic approximation.....	81

Fig. 5.9. Comparison of stacking fault energy and energy gain due to QWA effect in bipolar degradation, where ρ is the minority carrier density.	82
Fig. 5.10. Comparison of stacking fault energy and energy gain due to the QWA effect at thermal equilibrium.	83
Fig. 6.1. Specimen used in stress load test.	88
Fig. 6.2. Schematic diagram of 4-point bending.	88
Fig. 6.3. Schematic of submodeling analysis.	89
Fig. 6.4. (a) Overall view and (b), (c) enlarged view of mesh used in global analysis model. ..	91
Fig. 6.5. FE model of semi-local analysis model.	92
Fig. 6.6. FE model of local analysis model.	93
Fig. 6.7. Schematic diagram of pin diode in device simulations.	99
Fig. 6.8. Measurement area of Raman spectroscopy.	100
Fig. 6.9. Distribution of Raman frequency shift (E_2 mode) obtained by (a) Raman spectroscopy and (b) stress analysis.	100
Fig. 6.10. Distribution of critical resolved shear stress at 100 ° C obtained by global analysis.	101
Fig. 6.11. Distribution of (a) resolved shear stress at epi/sub interface and (b) resolved shear stress loaded by the 4-point bending, obtained by local analysis using a part of the region surrounded by a red frame in Fig. 6.10.	101
Fig. 6.12. Forward current voltage characteristics in experiment and analysis.	102
Fig. 6.13. Distribution of hole density used for validation.	103
Fig. 6.14. Hole distribution of pin diode at 100 °C and 300 A/cm ²	104
Fig. 6.15. Relationship between resolved shear stress and hole density at the origin of the stacking fault expansion.	105
Fig. 6.16. Relationship between resolved shear stress applied by stress test and the variation in critical minority carrier density.	105

表目次

Table 1.1. Physical properties of typical semiconductor materials. ¹	9
Table 3.2. Phonon frequencies (cm^{-1}) obtained by calculation and experiments.....	42
Table 3.1. Elastic constants (GPa) obtained by calculation and experiments.....	42
Table 3.3. Deformation potential constants calculated in this study ($\text{cm}^{-1}/\text{GPa}$).....	45
Table 4.1. Assumed MOSFET fabrication process and intrinsic stress.	64
Table 4.2 Material properties used in the stress analysis of SiC-MOSFET.....	66
Table 5.1 Comparison of Stacking energy at 0 K.....	75
Table 6.1. Analysis steps considered in each analysis models.....	90
Table 6.2. Material properties used in global analysis model.....	91
Table 6.3. Basic parameters of SiC used in device simulations.....	94
Table 6.4. Parameters used in mobility formula (6.8) ¹³	96
Table 6.5. Critical minority carrier density and its stress dependence when the assumed doping density of the epi / sub interface is changed.....	106
Table A.1. Dependence of lattice constant on exchange-correlation functional and comparison with experimental value.....	113
Table A.2. Dependence of elastic constants (GPa) on exchange correlation functional and comparison with experimental value.....	114
Table A.3. Dependence of Raman-active phonon frequencies (cm^{-1}) on exchange correlation functional and comparison with experimental value.....	114

第1章 序論

1.1. 研究背景

1.1.1. 4H-SiC パワーデバイス

動力に電気エネルギーを用いる機器では高効率な電流の制御や変換が重要となる。これらの電力変換に半導体デバイスを用いる技術はパワーエレクトロニクスと呼ばれ、AC-DC 変換（インバータ）、DC-AC 変換（コンバータ）や DC 電流の電圧変換、AC 電流の周波数変換等を担っている。このパワーエレクトロニクスに用いられる電力変換用半導体デバイスはパワーデバイスと呼ばれ、従来はシリコン（Si）半導体がいわれてきた。しかしながら、Si パワーデバイスの性能改善はその材料物性の限界に達しつつあると言われており、Si よりも物理特性の優れたワイドバンドギャップ（WBG）半導体を用いた次世代パワーデバイスの開発が期待されている。Table 1.1 に代表的な WBG 半導体と Si の主な物性値を示す。炭化ケイ素（SiC）には数多くの結晶多形（ポリタイプ）が存在するが、現在デバイス応用において最も注目されているのは六方晶である 4H-SiC である。これは、4H-SiC は SiC のポリタイプの中でも電子移動度、禁制帯幅（バンドギャップ）や絶縁破壊電界強度が大きい、電気伝導の異方性が小さい、ドナーやアクセプタの準位が比較的浅いという電気特性の特徴や、既に良質の単結晶ウェハが可能であり、その上に高品質なエピタキシャル成長層を形成する技術が開発されている等、製造面での都合が良いことが理由である¹。これらの 4H-SiC の特徴がデバイスにもたらす利点について以下に述べる。

パワーデバイス用の半導体材料として重要な物性の一つが絶縁破壊強度 E_B である。絶縁

Table 1.1. Physical properties of typical semiconductor materials.¹

	4H-SiC	Si	GaAs	GaN	diamond
Bandgap (eV)	3.26	1.12	1.42	3.42	5.47
Electron mobility (cm ² /Vs)	1000	1350	8500	1500	2000
Breakdown field strength (MV/cm)	2.8	0.3	0.4	3	8
Saturated drift velocity (cm/s)	2.2×10 ⁷	1.0×10 ⁷	1.0×10 ⁷	2.4×10 ⁷	2.5×10 ⁷
Thermal conductivity (W/cmK)	4.9	1.5	0.46	1.3	20

破壊強度は絶縁体や半導体材料が絶縁を保つことのできる最大の電界強度を指す。Fig. 1.1 に Si と SiC それぞれを用いて作製された pin ダイオードに逆方向耐圧 V_B を加えた場合の電界分布を示す。pin ダイオードの逆方向耐圧は、材料の絶縁破壊強度 E_B と空乏層（ドリフト層）の厚さ W_m を用いて $V_B = E_B W_m / 2$ と表すことができる^{1,2}。そのため、材料の絶縁破壊強度が高いと、その分デバイス中の耐圧層（ドリフト層領域）の幅を小さく設計することが可能となる。また、ドリフト層のドーピング密度は電界分布の傾きに比例するため、SiC は高濃度のドーピング化が可能であり、ON 抵抗を決める最大要因であるドリフト層の抵抗を小さくすることができる。これらの効果により、Si の約 10 倍の絶縁破壊強度を持つ 4H-SiC を用いたパワーデバイスと同じ耐圧を持つ Si パワーデバイスに比べ、耐圧層の厚さを 1/10 に、ドーピング濃度を 100 倍にすることができ、この結果 ON 抵抗を 2~3 桁低減させることができる。また SiC の高耐圧という特徴は、高速動作という利点にもつながる。例えば、Si では IGBT (Insulated Gate Bipolar Transistor) のようなバイポーラデバイスが必要とされていた耐圧 (600V 以上) においても、SiC ではユニポーラデバイスを適用可能であるため、高速なスイッチングが可能となりスイッチング損失の低減につながる³。4H-SiC のもう一つの大きな特徴がシリコンの約 3 倍大きいバンドギャップである。バンドギャップが大きいことにより、価電子帯の電子の熱励起が防がれるため、高温動作時のリーク電流を抑制することが可能となる。Si パワーデバイスでは最高動作温度は 150~200 °C 程度に制限されるため、巨大な冷却機器が必要となっている。そのため、SiC パワーデバイスを用いる事により 200 °C 以上の高温動作が可能となれば、冷却機器の大幅な小型化が期待される。高い熱伝導率も冷却の効率化への寄与が期待される。

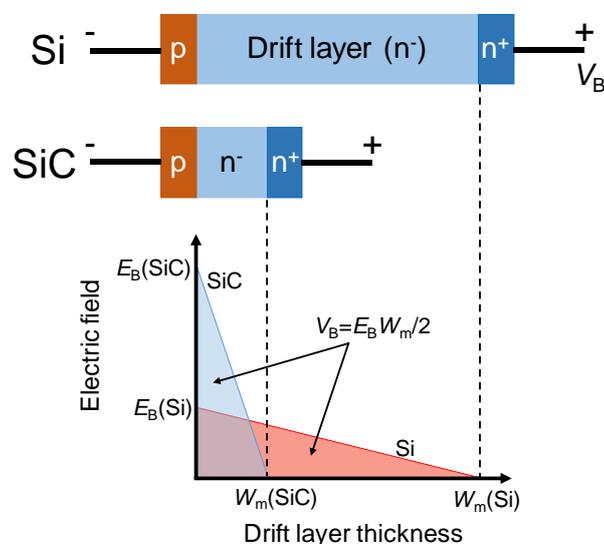


Fig. 1.1. Electric field distribution in a pin diode at the same reverse voltage. The reverse breakdown voltage V_B of a pin diode is represented by the area of a right triangle whose side length are the electric field strength E_B and the depletion layer thickness W_m .

WBG 半導体としては SiC 以外にも, GaN⁴や Ga₂O₃⁵, ダイヤモンド半導体⁶等の活用が期待されている. これらの半導体を用いたデバイスは SiC デバイスと同等, もしくはそれ以上の性能を有することが示唆されている. しかしながら現状では, これらの材料では欠陥密度が少なく大口径なウェハの作成が実現に至っていないという点や, SiC デバイスと異なり従来の熱酸化等 Si デバイスで活用されていた技術の転用が困難であるなどの課題が残っている. そのため, 特に SiC で期待される高耐圧縦型パワーデバイスへの実用化には至っていない. ただし, GaN ではすでに横型デバイスや HEMT (High Electron Mobility Transistor) の開発が進められており, 特に高周波デバイスへの適用が期待されている. 今後は Si を含め, 必要とされる耐圧や周波数に応じて材料の使い分けが進むものと考えられる.

SiC パワーデバイスはこれまでに, ユニポーラデバイスである MOSFET や SBD が実用化^{7,8}されており, 2019 年現在は鉄道やカーエレクトロニクスにおける採用が進んでいる⁹. また, その高耐圧という特徴から, これまで Si パワーデバイスでは実現されていなかった 10kV 級の超高耐圧デバイス^{10,11}の開発が期待されている. この実現のためには pin ダイオードやバイポーラトランジスタ (BJT), IGBT といった SiC バイポーラデバイスの実用化が必要となる. 1.1.2 では, これらの SiC パワーデバイスの課題について信頼性設計の観点から述べる.

1.1.2. 信頼性設計における課題

4H-SiC の高温動作, 高耐圧といった特徴を活かしたデバイスの設計にはそのような過酷な動作環境における信頼性の確保が重要となる. しかしながら, 4H-SiC デバイスの信頼性設計についてはいくつかの課題が残されているのが現状である.

1つ目の課題が, 応力や熱による電気特性の変動である. パワーデバイスには半導体デバイス製造時に生じる残留応力, モジュール組立時に生じる実装応力, デバイス駆動時の自己発熱による熱応力など, 様々な応力が加わる. デバイスの電気特性は応力や熱の影響で変動することが知られている¹²⁻¹⁴. Si デバイスではこの特性を利用した歪み Si デバイスの利用も進められている¹⁵が, 一般にこの電気特性の変動は予期せぬ電気特性の変動や不具合の

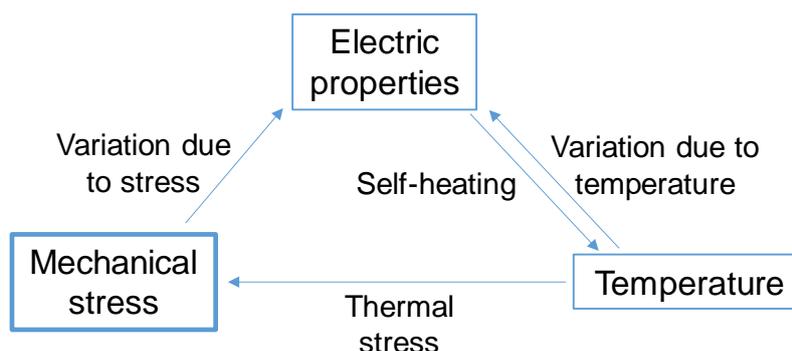


Fig. 1.2. Interaction of electrical properties, temperature, and mechanical stress.

原因として、デバイスの信頼性を低下させる原因となる。特に SiC デバイスは高電流密度、高温といった過酷な環境下での使用が想定されるため、デバイスの信頼性を確保するためには動作時の電気特性を予測する技術が求められる。Fig.1.2 に示すように、熱・応力・電気特性は相互に影響を及ぼしあうため、これらを個別に検討するのみでは予期しない変動による信頼性の低下が懸念される。そのため、パワーデバイスやそれを使用したパワーモジュールの信頼性向上には、熱・応力・電気の相互影響を統合した連成解析¹⁶が必要となる。しかしながら、SiC デバイスでは連成解析を実現するために必要となるデバイス内部の応力分布を高精度に予測する手法がまだ確立されていない。

もう一つの大きな課題が、4H-SiC を用いたバイポーラデバイスで生じる順方向電圧特性の劣化^{17,18}である。これはバイポーラデバイスの動作中に順方向特性が劣化し、on 抵抗の増大や異常発熱による発火を招くという現象である。順方向劣化やバイポーラ劣化 (bipolar degradation) と呼ばれるこの現象は、動作中にデバイス内部の積層欠陥 (stacking fault) が急速に拡大すること¹⁹が原因であることがわかっている。この現象は積層欠陥の境界となる部分転位が室温程度の低温においても急速に移動し、またその駆動力がせん断応力のみでは説明できない²⁰という非常に特異な現象である。そのため、現象の解明のためにこれまでに多くの研究²¹⁻²⁴がなされてきており、転位移動の活性化は Recombination-enhanced-dislocation-glide (REDG)²³⁻²⁵で、その駆動力は Quantum-well-action (QWA) と呼ばれる積層欠陥へのキャリア捕獲によるエネルギー低下^{24,26-29}で説明可能であることがわかってきている。これらの詳細については2章で述べる。QWA モデルおよび転位論に基づく積層欠陥の拡大は、QWA による電気的なエネルギー低下、結晶構造の不整合による積層欠陥エネルギー、および部分転位に働く応力の3つの合計の符号で判断できると考えることができる。しかしながら、QWA による電気的なエネルギー低下については近年バンド構造を考慮した計算結果が報告されている²⁷⁻²⁹一方で、それ以外の積層欠陥エネルギーの温度依存性や転位に働く応力の影響についての検討は十分には行われていないのが現状である。信頼性設計の観点からは、順方向劣化の指標となる臨界少数キャリア密度の高精度な決定やデバイス製造やその後の実装工程、使用条件下の熱や応力による変動の予測が重要となる。これらの課題の解決のためには、積層欠陥エネルギーの温度依存性や転位に応力が与える影響といった力学的な観点と、デバイス動作時のキャリア分布や QWA によるエネルギー利得といった電気的な観点の両方からの検討とモデリングが必要となる。

1.2. 研究目的

1.1.2 で述べた課題を解決するため、本研究では4H-SiC パワーデバイスの信頼性設計に必要な応力分布や熱・応力が順方向劣化現象へ与える影響を定量的に明らかにすることを目的とする。そのために、パワーデバイス内部の力学・電気特性を解析する技術の構築を

行う。具体的には、(1) 応力による電気特性の変動や転位にかかる分解せん断応力を明らかにするために必要となる、SiC パワーデバイス内部の応力分布を詳細に明らかにする手法の開発と(2) 順方向劣化問題における積層欠陥拡大の基準となる臨界少数キャリア密度へ熱・応力が与える影響の解明である。

まず、1つ目の SiC パワーデバイス内部の応力分布を解析する手法の開発について説明する。従来、Si デバイスの応力評価にはラマン分光法³⁰⁻³⁸がよく用いられてきた。ラマン分光法は半導体にレーザー光を照射した際に生じるラマン散乱光を用いて、ラマンシフトと呼ばれる入射光とラマン散乱光の振動数差を測定する手法である。ラマン散乱スペクトルのピークについて、無応力状態を基準にラマンシフトの変動量の空間分布を測定することにより応力分布を評価することができる。六方晶である 4H-SiC についてはその対称性に基づきフォノン変形ポテンシャル^{39,40}を用いる事により、応力とラマンシフトの関係を記述することが可能である。しかしながら、定量的な関係を示す変形ポテンシャル係数はこれまで一軸引張による実験結果^{41,42}が報告されているのみで多軸応力やせん断応力の影響は明らかではなかった。そのため、本研究ではまず、第一原理計算により 4H-SiC のフォノン変形ポテンシャル定数を決定する。また、ラマンシフトはスカラー量であるため、ラマン分光法のみでは6成分のテンソル量である応力の分布を評価することは不可能である。そこで、有限要素法 (FEM) とラマン分光法を組み合わせる応力解析手法³³⁻³⁷の構築を行う。また、正確な応力分布の推定のため、デバイス製造過程で SiC 上に成膜される薄膜の材料定数や真性応力の測定を行う。解析対象には順方向劣時の積層欠陥拡大に関するその場観察用に設計された pin ダイオード⁴³⁻⁴⁵を用い、積層欠陥拡大起点の分解せん断応力を明らかにする。また、開発した応力解析手法の発展として、電気特性が重要となる SiC-MOSFET の残留応力解析を行う。

次に、2つ目の順方向劣化問題における積層欠陥拡大の判定の基準となる臨界少数キャリア密度へ熱・応力が与える影響の解明について説明する。1.1.2 で述べた通り、順方向劣化現象における積層欠陥の拡大は REDG と QWA でモデル化ができると考えられおり、特に QWA によるエネルギー低下については近年その少数キャリア密度依存性、不純物濃度依存性や温度依存性の計算が行われてきている²⁷⁻²⁹。一方で、積層欠陥エネルギーの温度依存性や転位に働く応力の影響についての検討は十分には行われていない。そのため、まず本研究では 4H-SiC の積層欠陥エネルギーの温度依存性を第一原理計算を用いて明らかにする。得られた結果を QWA モデルに適用することにより、理想的な条件における積層欠陥拡大の臨界少数キャリア密度の推定を行う。次に、共同研究で行われた外部応力による積層欠陥拡大の閾値電流密度の変化に関する実験結果⁴⁵を基に、部分転位に働く分解せん断応力と臨界少数キャリア密度の関係を明らかにする。

1.3. 論文の構成

本論文は本文7章と付録で構成される。各章のつながりを図式化したものを Fig. 1.2 に示す。第1章では本研究の背景と目的について述べた。第2章では、まず4H-SiCの結晶学的な特徴についてまとめ、先行研究を基に順方向劣化現象を部分転位の移動に注目して説明する。また、本研究で用いる手法のうち、ラマン分光法とデバイスシミュレーションの基礎について説明する。第3章、第4章では、4H-SiC パワーデバイス内部の応力解析を行う手法の開発を行う。まず、第3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を求める。第4章では、有限要素法（FEM）とラマン分光法を組み合わせる応力解析手法の構築を行う。

第5章、第6章では、順方向劣化問題に熱・応力が与える影響について検討する。第5章では、積層欠陥拡大条件の定量的な検討に必要な、積層欠陥エネルギーの温度依存性の推定を第一原理計算により行う。得られた結果をQWAモデルに適用することにより、理想的な条件における積層欠陥拡大の臨界少数キャリア密度の推定を行う。第6章では、部分転位に働く分解せん断応力と臨界少数キャリア密度の関係を明らかにする。共同研究で行われた外部応力による積層欠陥拡大の閾値電流密度の変化に関する実験結果⁴⁵を基に、分解せん断応力を明らかにするためのFEM解析と電流密度から少数キャリア密度を求めるためデバイスシミュレーションの構築を行う。得られた分解せん断応力と臨界少数キャリア密度の関係について、第2章で説明したQWAと転位論に基づいて議論する。第7章は本論文の結言である。

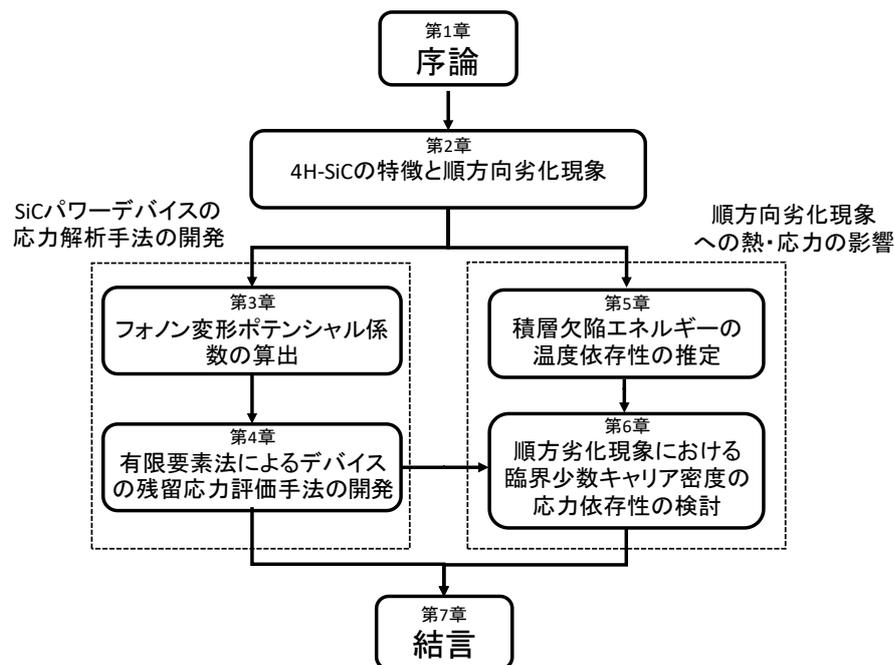


Fig. 1.3. Flowchart of this thesis.

本章の参考文献

- ¹ 松波弘之, 大谷昇, 木本恒暢, and 中村孝, *半導体SiC技術と応用*, 2nd ed. (日刊工業新聞社, 東京, 2011).
- ² 大橋弘通 and 葛原正明, *パワーデバイス* (丸善, 東京, 2011).
- ³ 菅沼克昭, *SiC/GaNパワー半導体の実装と信頼性評価技術* (日刊工業新聞社, 東京, 2014).
- ⁴ T. Ueda, *Jpn. J. Appl. Phys.* **58**, SC0804 (2019).
- ⁵ M. Higashiwaki, K. Sasaki, H. Murakami, Y. Kumagai, A. Koukitu, A. Kuramata, T. Masui, and S. Yamakoshi, *Semicond. Sci. Technol.* **31**, 034001 (2016).
- ⁶ H. Umezawa, *Mater. Sci. Semicond. Process.* **78**, 147 (2018).
- ⁷ Wolfspeed, (n.d.).
- ⁸ ROHM Co. Ltd., (n.d.).
- ⁹ 上野雅之, in *J-Rail 2017* (2017).
- ¹⁰ N. Kaji, H. Niwa, J. Suda, and T. Kimoto, *IEEE Trans. Electron Devices* **62**, 374 (2015).
- ¹¹ H. Miyake, T. Okuda, H. Niwa, T. Kimoto, and J. Suda, *IEEE Electron Device Lett.* **33**, 1598 (2012).
- ¹² A. Hamada, T. Furusawa, N. Saito, and E. Takeda, *IEEE Trans. Electron Devices* **38**, 895 (1991).
- ¹³ M. Koganemaru, T. Ikeda, N. Miyazaki, and H. Tomokage, *IEEE Trans. Components Packag. Technol.* **33**, 278 (2010).
- ¹⁴ K. Yosida, M. Koganemaru, T. Ikeda, N. Miyazaki, and H. Tomokage, *エレクトロニクス実装学会誌* **14**, 45 (2011).
- ¹⁵ K. UCHIDA, *J. Vac. Soc. Japan* **51**, 301 (2008).
- ¹⁶ M. Kato, A. Goryu, A. Kano, K. Takao, and S. Izumi, *電子情報通信学会論文誌 C J102-C*, 30 (2019).
- ¹⁷ H. Lendenmann, F. Dahlquist, N. Johansson, R. Söderholm, P.Å. Nilsson, P. Bergman, and P. Skytt, *Mater. Sci. Forum* **353–356**, 727 (2001).
- ¹⁸ P. Bergman, H. Lendenmann, P.Å. Nilsson, U. Lindefelt, and P. Skytt, *Mater. Sci. Forum* **353–356**, 299 (2001).
- ¹⁹ J.Q. Liu, M. Skowronski, C. Hallin, R. Söderholm, and H. Lendenmann, *Appl. Phys. Lett.* **80**, 749 (2002).
- ²⁰ S. Ha, M. Skowronski, J.J. Sumakeris, M.J. Paisley, and M.K. Das, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 175504 (2004).
- ²¹ J.D. Caldwell, R.E. Stahlbush, M.G. Ancona, O.J. Glembocki, and K.D. Hobart, *J. Appl. Phys.* **108**, 044503 (2010).
- ²² P. Pirouz, *Phys. Status Solidi* **210**, 181 (2013).
- ²³ K. Maeda, *MRS Proc.* **1195**, 1195 (2009).
- ²⁴ K. Maeda, in *Mater. Reliab. Handb. Semicond. Opt. Electron Devices*, edited by O. Ueda and S.J. Pearton (Springer, New York, 2013), pp. 263–281.

- ²⁵ K. Maeda and S. Takeuchi, in *Dislocations in Solids*, edited by F.R.N. Nabarro and M.S. Duesbery (Elsevier, Amsterdam, 1996), pp. 443–504.
- ²⁶ T.A. Kuhr, J. Liu, H.J. Chung, M. Skowronski, and F. Szmulowicz, *J. Appl. Phys.* **92**, 5863 (2002).
- ²⁷ C. Taniguchi, A. Ichimura, N. Ohtani, M. Katsuno, T. Fujimoto, S. Sato, H. Tsuge, and T. Yano, *J. Appl. Phys.* **119**, 145704 (2016).
- ²⁸ Y. Mannen, K. Shimada, K. Asada, and N. Ohtani, *J. Appl. Phys.* **125**, 085705 (2019).
- ²⁹ A. Iijima and T. Kimoto, *J. Appl. Phys.* **126**, 105703 (2019).
- ³⁰ I. De Wolf, H.E. Maes, and S.K. Jones, *J. Appl. Phys.* **79**, 7148 (1996).
- ³¹ I. De Wolf, *Semicond. Sci. Technol.* **11**, 139 (1996).
- ³² I. De Wolf, C. Jian, and W.M. van Spengen, *Opt. Lasers Eng.* **36**, 213 (2001).
- ³³ M. Yoshikawa, M. Maegawa, G. Katagiri, and H. Ishida, *J. Appl. Phys.* **78**, 941 (1995).
- ³⁴ E. Bonera, M. Fanciulli, and G. Carnevale, *J. Appl. Phys.* **100**, 033516 (2006).
- ³⁵ T. Tada, V. Poborchii, and T. Kanayama, *J. Appl. Phys.* **107**, 113539 (2010).
- ³⁶ V. Senez, A. Armigliato, I. De Wolf, G. Carnevale, R. Balboni, S. Frabboni, and A. Benedetti, *J. Appl. Phys.* **94**, 5574 (2003).
- ³⁷ A. Yagishita, T. Saito, S. Matsuda, and Y. Ushiku, *Jpn. J. Appl. Phys.* **36**, 1335 (1997).
- ³⁸ R. Sugie, K. Kosaka, H. Seki, H. Hashimoto, and M. Yoshikawa, *J. Appl. Phys.* **114**, 233503 (2013).
- ³⁹ V.J. Tekippe, A.K. Ramdas, and S. Rodriguez, *Phys. Rev. B* **8**, 706 (1973).
- ⁴⁰ R.J. Briggs and A.K. Ramdas, *Phys. Rev. B* **13**, 5518 (1976).
- ⁴¹ N. Sugiyama, M. Yamada, Y. Urakami, M. Kobayashi, T. Masuda, K. Nishikawa, F. Hirose, and S. Onda, *MRS Proc.* **1693**, mrss14 (2014).
- ⁴² R. Sugie and T. Uchida, *J. Appl. Phys.* **122**, 195703 (2017).
- ⁴³ T. Tawara, S. Matsunaga, T. Fujimoto, M. Ryo, M. Miyazato, T. Miyazawa, K. Takenaka, M. Miyajima, A. Otsuki, Y. Yonezawa, T. Kato, H. Okumura, T. Kimoto, and H. Tsuchida, *J. Appl. Phys.* **123**, 025707 (2018).
- ⁴⁴ A. Okada, J. Nishio, R. Iijima, C. Ota, A. Goryu, M. Miyazato, M. Ryo, T. Shinohe, M. Miyajima, T. Kato, Y. Yonezawa, and H. Okumura, *Jpn. J. Appl. Phys.* **57**, 061301 (2018).
- ⁴⁵ A. Goryu, A. Kano, M. Kato, C. Ota, A. Okada, J. Nishio, S. Izumi, and K. Hirohata, *Mater. Sci. Forum* **963**, 288 (2019).

第2章 4H-SiC の結晶構造と順方向劣化現象 および関連手法

2.1. 緒言

本章ではまず、4H-SiC の結晶構造について積層欠陥を中心に説明する。次に順方向劣化現象とその原因となる積層欠陥の拡大現象について、その現象の概要と転位移動の観点からのモデル化について説明する。また、本論文中で用いられる手法のうち、ラマン分光法を用いた応力解析とデバイスシミュレーションについてその基礎理論を説明する。

2.2. 4H-SiC の結晶構造

シリコン (Si) と炭素 (C) の IV-IV 族化合物であるシリコンカーバイド (SiC) は、1880 年代に Acheson により合成プロセスが開発され、主に研磨剤や耐熱材として使用されてきた。半導体材料としての SiC が注目されるようになったのは 1950 年代以降で、1955 年の SiC 単結晶の製造方法 (Lely 法) の開発、1978 年の SiC 単結晶ウェハの製造法の開発 (改良 Lely 法)^{1,2}、1987 年以降の高品質エピタキシャル成長法 (ステップ制御エピタキシー) の開

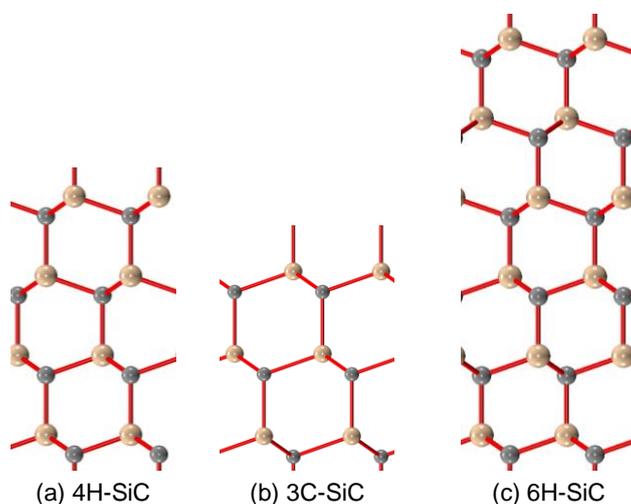


Fig. 2.1. Typical polytype structures of SiC crystals.

発³を経て、1990年代以降 SiC デバイスの研究開発が盛んとなった。

SiC の大きな特徴として 200 種類以上が確認されている結晶多形（ポリタイプ）がある。上記の改良レイリー法やステップ制御エピタキシーはこの結晶多形を防ぐためのポリタイプ制御技術として開発されている。Fig. 2.1 に SiC の代表的な結晶多形である 3C-SiC, 4H-SiC, 6H-SiC の積層構造を示す。これらの構造は Si-C 対（バイレイヤー）の積層方向（ c 軸方向）の積み重なり方の違いによって区別され、最初の数字が c 軸方向 1 周期あたり含まれる SiC バイレイヤーの数を、続く C, H は結晶系の頭文字（C：立方晶，H：六方晶）を示している。製造される結晶多形はその温度や製造方法により異なるが、結晶多形間の凝集エネルギーの差は 1 原子あたり数 meV 程度と非常に小さく⁴，原子間距離も殆ど変わらないため異なる結晶多形が混在しやすい。このため、積層欠陥エネルギーも低いこと⁵⁻⁷が知られており、このことが後述する積層欠陥の拡大現象の原因の一つとなっている。

2.3. 4H-SiC の転位と積層欠陥

2.3.1. 4H-SiC の転位と BPD/TED 変換

六方晶である 4H-SiC 結晶中の転位は、その転位線とバーガースベクトルの関係より 3 種類に大別される。転位線が c 軸に殆ど並行な向きの転位は貫通転位（Threading dislocation）と呼ばれ、 $1c$ のバーガースベクトルを有する貫通らせん転位（Threading screw dislocation; TSD）と $1/3(11\bar{2}0)$ のバーガースベクトルを有する貫通刃状転位（Threading edge dislocation; TED）がある。一方、転位線が c 軸に垂直（基底面内に広がる）転位は基底面転位（Basal plane dislocation; BPD）と呼ばれ、そのバーガースベクトルは TED と同じ $1/3(11\bar{2}0)$ である。TED, TSD はバルク中では不動転位であり、デバイスの性能や信頼性に与える影響は BPD に比べ小さい^{8,9}。そのため、エピタキシャル成長では基板中の BPD を TED へと変換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¹⁰⁻¹⁶がとられている。Fig.

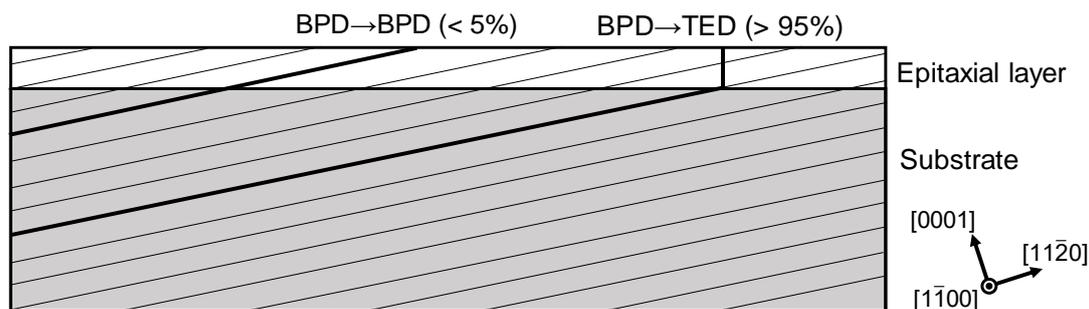


Fig. 2.2. Schematic diagram of the BPD/TED conversion.

2.2 にエピタキシャル成長における変換の模式図を示す。基底面を僅かに傾けたウェハを用いて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 は TED へと変換 (BPD/TED 変換) され、現在では 4°オフ基板を用いることで基板中に $10^2\text{--}10^3\text{ cm}^2$ 程度存在する BPD をエピタキシャル成長層では 0.1 cm^2 程度にまで低減することが可能である¹⁶。Fig. 2.2 に示したように BPD/TED 変換点は基板とエピ層の界面に分布するが、その位置にはばらつきがあり、基板中に変換点が入り込んでいる場合があることがわかっている¹⁷⁻¹⁹。

2.3.2. 基底面転位の分裂

Fig. 2.3(a) に B_1 の位置にある原子がすべり運動により B_2 にまで動く経路を示す。完全転位である BPD のバーガースベクトルに従い原子が B_1 から B_2 へとすべり運動をする場合、原子は B_1 から B_2 へ直接移動するよりも、A 原子の間の隙間を通って $B_1 \rightarrow C \rightarrow B_2$ 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 $B_1 \rightarrow C$ と $C \rightarrow B_2$ の移動に相当する異な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。

$$\frac{1}{3}\langle 11\bar{2}0 \rangle \rightarrow \frac{1}{3}\langle 10\bar{1}0 \rangle + \frac{1}{3}\langle 01\bar{1}0 \rangle. \quad (2.1)$$

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、Fig. 2.3(b) に示すようにこの 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 (Shockley-type stacking fault; SSF) と呼ばれる。特に、積層欠陥が 1 層のみである構造をシングルショックレー型積層欠陥 (Single Shockley-type

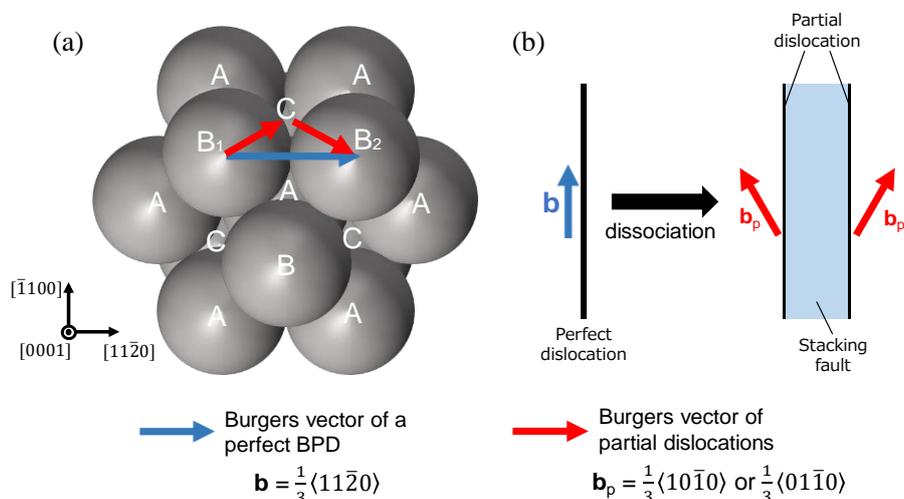


Fig. 2.3. Schematic illustration of dissociation of perfect BPD.

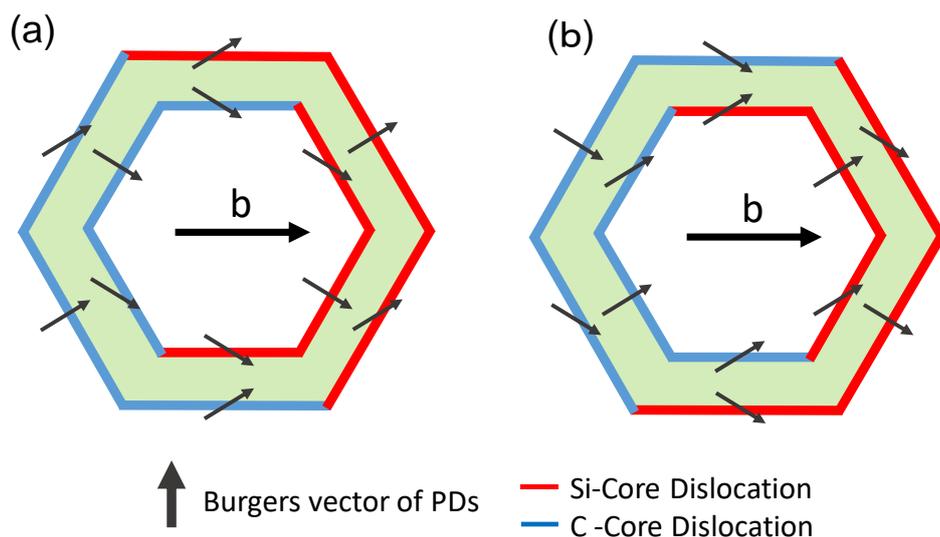


Fig. 2.5. Schematic illustrations of two different dissociated PD loops.

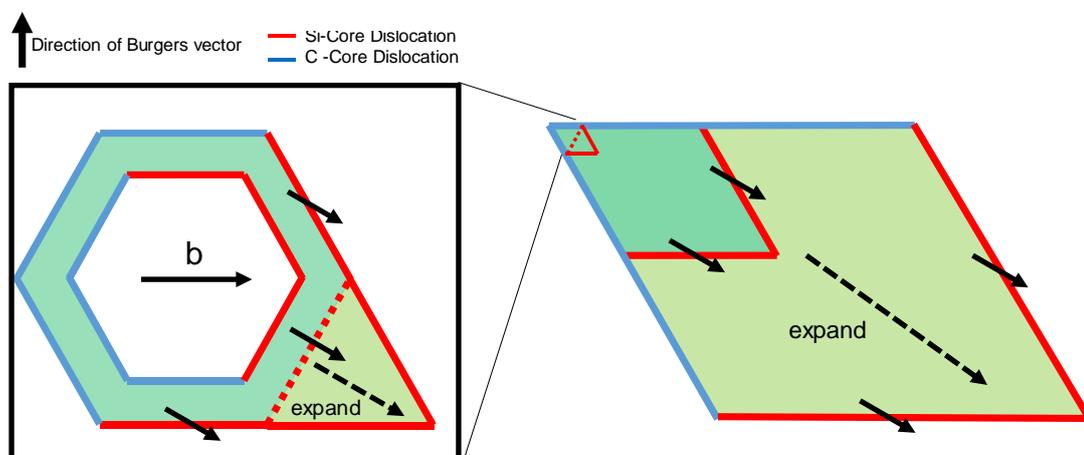


Fig. 2.6. The schematic diagram of the expansion of a stacking fault.

転位芯に持つ Si-core 部分転位と C を転位芯にもつ C-core 部分転位に分けられる。また、バーガ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つに分けられる。これらの組み合わせにより、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-Core PD はすべり運動を起こしやすいのに対し、C-Core PD は動きにくく常温では不動であることが実験²²⁻²⁴や活性化エネルギーの計算により報告されている^{25,26}。また、90°PD は30°PD に比べ非常に活性化エネルギーが小さく、移動速度が速いこともわかっている²⁷。そのため、主な積層欠陥の形状は Fig. 2.6 に示すように Si-Core 30°PD と C-Core 30°PD の2種類の部分転位により形成されると考えることができる²⁰。

2.4. 順方向劣化現象と積層欠陥の拡大

2.4.1. 順方向劣化現象

第 1 章でも述べたように、4H-SiC で作成された pin ダイオードには、順方向劣化やバイポーラ劣化 (bipolar degradation) と呼ばれる、順方向動作中に順方向電圧降下が増大し、性能の劣化や故障を招く現象が生じることが知られている²⁷⁻²⁹。この現象は、電気伝導に対する抵抗となる SSSF が電荷輸送を担うキャリアの注入により拡大することが原因であることがわかっている^{8,9,27}。

Fig. 2.7 に pin ダイオードにおける積層欠陥拡大の模式図を示す。エピタキシャル成長時に TED へと変換されずに残った BPD は、 $1/3[11\bar{2}0]$ のバーガースベクトルを持つらせん転位になることが知られている。このらせん BPD は、Fig. 2.5 からわかるように 30° Si-Core PD と 30° C-Core PD に分解しており、拡大すると Si-Core 転位のみが動き Fig. 2.7(a) に示すように三角欠陥と呼ばれる積層欠陥を形成する。一方、エピ/サブ界面付近で TED へと変換された BPD は、BPD/TED 変換点を起点に積層欠陥が拡大し、その一部は三角欠陥を、その他は Fig. 2.7(b) に示すような帯状欠陥と呼ばれる積層欠陥を形成することが知られている。拡大後の形状と転位線の関係は、そのバーガースベクトルに注目する事により整理されている^{20,21}。帯状欠陥は三角欠陥に比べ面積が大きくなる³⁰ことから、デバイスの信頼性に与える悪影響は帯状欠陥の方が大きい。拡大した積層欠陥は 200 °C 程度以上での微弱な電流印加³¹⁻³³や UV 照射³⁴、350~550 °C 程度への加熱³⁵により縮小することが知られている。そのため、この拡張/縮小の閾値やそのモデリングに対する注目が集まっている³⁶⁻⁴⁰。

この積層欠陥の拡大/縮小現象には 2 つの大きな特徴がある。1 つ目が、通常は転位が動かない室温付近においても電流を流すことにより積層欠陥の境界となる部分転位が急速に

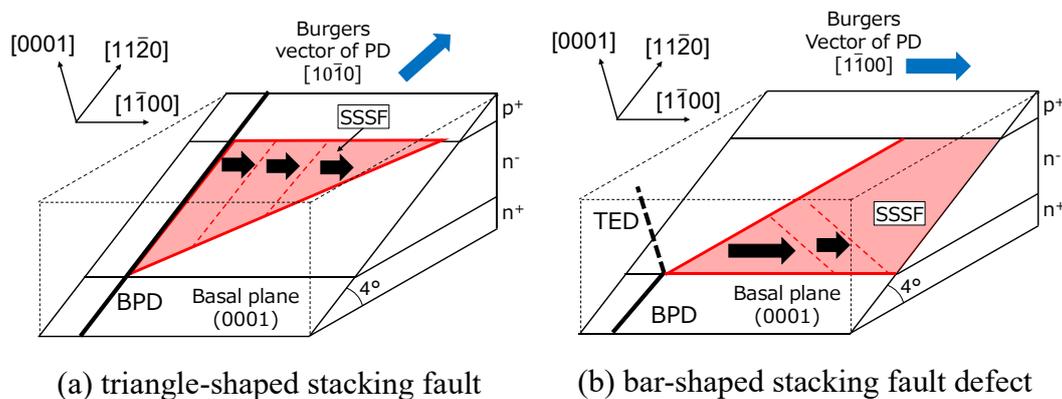


Fig. 2.7. Schematic illustrations of the shape and the origin of a (a) triangle-shaped stacking fault and a (b) bar-shaped stacking fault in a SiC pin diode.

移動すること。2つ目が、電流密度により拡大/縮小が切り替わる³⁶ことからわかるように、転位移動の支配的な駆動力が分解せん断応力ではないこと⁴¹である。SiCバイポーラゲバイスの信頼性を確保する上での重大な障害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こ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。以下では、転位の移動について2.4.2で転位論に基づく基礎的な説明を述べた後、2.4.3以降で転位移動に注目した場合の順方向劣化現象のモデル化について説明する。

2.4.2. 転位の移動

① 転位移動の活性化エネルギー

転位が移動するためには、結合の組み換えが必要となる。Fig. 2.8に刃状転位がバーガースベクトル \mathbf{b} だけ移動する場合の結合の変化の例を示す。Fig. 2.8(a)とFig. 2.8(c)に示される転位の移動前後では、転位の位置は変化しているが転位周辺の原子の結合に違いはない。そのため、②で説明する外部応力などによる転位の移動前後でのエネルギーの変化を除けば、(a)と(c)はエネルギー的には等価な関係となる。一方で、Fig. 2.8(b)に示す転位が移動する途中の状態では、結合の組み換えにより一時的にエネルギー状態の高い状態が生じる。このときのエネルギー準位変化の様子をFig. 2.9に示す。Fig. 2.9からわかるように転位が \mathbf{b} だけ移動するためには、結合の組み換えに伴うエネルギー障壁を乗り越える必要がある。この、転位心周辺の原子配置で決まるエネルギーポテンシャルは一般にパイエルスポテンシャル (Peierls potential) と呼ばれている。特にSiCのような共有結合性の結晶では、原子間の結合力が強くこのパイエルスポテンシャルが大きいのが特徴であり、2.3.2.で述べた転位の配向性は、このパイエルスポテンシャルに由来していると考えられる。また、特に転位の移動に注目した場合、最大で E_{act} となるこのエネルギー障壁は転位移動の活性化エネルギーやエネルギー障壁と呼ばれ、転位の移動速度の指標となる。エネルギー障壁が高い共有結合性の結晶は転位が殆ど動かないため、脆性的に破壊する。一方でエネルギー障壁が低い金属は転位が活発に移動することができるため、延性的に破壊する。

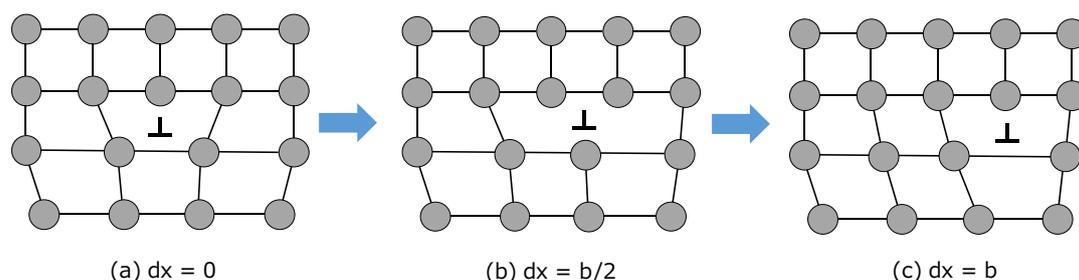


Fig. 2.8 Schematic of Rearrangement of bonds during dislocations movement.

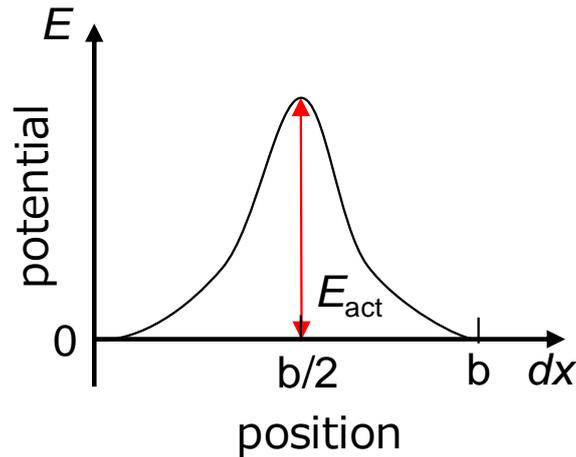


Fig. 2.9. Energy diagram of dislocation movement

この活性化エネルギーを乗り越えて転位が移動するためには、転位に対するエネルギーの供給が必要となる。絶対零度においてはこのせん断応力を加える必要があるが、有限温度においては原子の熱振動がそのエネルギー供給源として働く。そのため、一般に転位の移動は熱確率過程となり温度が高いほど転位は移動しやすい。これは、Si や 4H-SiC などの室温で脆性な材料も高温に加熱することにより延性的に破壊することに対応する^{42,43}。また、ここでは簡単のため2次元結晶における解釈を述べたが、実際の3次元結晶における転位の移動では kink の生成や移動を伴うため、転位移動の活性化エネルギー E_{act} はこれらの現象それぞれのエネルギー障壁により決定される。

② 転位移動前後のエネルギー変化：転位移動の駆動力

分解せん断応力 τ^{rss} を受ける系において、積層欠陥端の長さ l の転位線が x だけ移動することを考える。このとき、転位のすべりにより開放される系のエネルギー W は部分転位のバーガスベクトルの大きさ b を用いて $W = \tau^{rss} b l x$ で与えられる。一方、積層欠陥の面積が $l x$ だけ拡大するのに必要なエネルギーは積層欠陥エネルギー γ_{SF} を用いて $\gamma_{SF} l x$ で与えられる。そのため、 τ^{rss} の存在下における積層欠陥拡大前後のエネルギー変化 ΔE_{drv} は

$$\Delta E_{drv} = \gamma_{SF} l x - W = (\gamma_{SF} - \tau^{rss} b) l x, \quad (2.2)$$

となる。分解せん断応力 τ^{rss} は転位線の周囲の応力場からすべり面上のすべり方向のせん断応力成分を求めることにより得られる⁴⁴。転位に働く応力として外力による分解せん断応力 τ_{ext}^{rss} と転位間の相互作用力 τ_{int}^{rss} を仮定すると $\tau^{rss} = \tau_{ext}^{rss} + \tau_{int}^{rss}$ となる。よって積層欠陥端の部分転位に働く単位長さあたりの駆動力 $\tau_{drv} b$ ($= -\frac{1}{l} \frac{\partial \Delta E_{drv}}{\partial x}$) は式(2.3),

$$\tau_{\text{drv}}b = (\tau_{\text{ext}}^{\text{RSS}} + \tau_{\text{int}}^{\text{RSS}})b - \gamma_{\text{SF}}, \quad (2.3)$$

で表される. 外力が存在しない場合には, $\tau_{\text{int}}^{\text{RSS}}$ と γ_{SF}/b が釣り合うため, 部分転位間の平衡距離を測定することにより弾性論から積層欠陥エネルギーを測定することが可能となる^{5,44-46}.

一般的に, 転位の移動速度 v は実験的に以下の式(2.4),

$$v = A_0 \left(\frac{\tau_{\text{drv}}}{\tau_0} \right)^m \exp\left(\frac{-E_{\text{act}}}{k_B T} \right), \quad (2.4)$$

で示される^{44,47,48}. ここで k_B , T はそれぞれボルツマン定数, 絶対温度である. また, A_0 , τ_0 , n は物質依存の定数で, v の符号は積層欠陥が拡大する方向を正とする. 半導体材料において m は1~2の間の範囲であるとされ, SiCでは400 °C ~ 700 °Cで30° Si-Core PDについて $m=1.2\sim 1.8$ 程度^{49,50}と報告されている.

2.4.3. 転位移動の活性化 (REDG)

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. 電圧を印加すると, ドリフト層においてこの電子と正孔の再結合が頻繁に生じる. この再結合により生じたエネルギーが転位芯での原子の結合の組み換えを促進し, 転位移動の活性化エネルギー E_{act} を低下させる, すなわち転位の移動を促すエネルギーとなる. この現象は Recombination-enhanced dislocation glide (REDG) と呼ばれている. また, REDGは順方向電圧印加時だけでなく, 光や電子線の照射によっても引き起こされ, GaAs, ZnS, Si, Geなど多くの半導体で報告されている^{48,51,52}. ただし, 先行研究^{53,54}では4H-SiCにおけるこの現象は, 正孔と電子の非輻射再結合ではなく, 転位の光イオン化により生じるとの解釈も報告されており, REDG現象の完全な解明には至っていない. また4H-SiCではREDGによりSi-Core転位の移動が活性化される一方で, C-Core転位の移動は本現象では活性化されないことが知られている²⁴.

光照射の場合, 再結合により転位移動が活性化される比率を照射強度の関数として $r(I)$, 活性化エネルギーの低下量を ΔE とすると, REDGによる転位の活性化は式(2.5)のように定式化される.

$$v = A_0 \left(\frac{\tau}{\tau_0} \right)^m \left\{ \exp\left(\frac{-E_{\text{act}}}{k_B T} \right) + B_0 r(I) \exp\left(\frac{-(E_{\text{act}} - \Delta E)}{k_B T} \right) \right\}. \quad (2.5)$$

電子や正孔が供給されるという点は光照射とキャリア注入で大きくは変わらないため, この式(2.3)は, $r(I)$ に関する議論が必要となるが, キャリア注入の場合にも有効であると考えられる. 30° Si-Core PDの場合, $E_{\text{act}} = 1.4 \pm 0.2$ eV⁴⁹程度と考えられているが, 近年の報告では2.8eVとの指摘⁵⁵もあり, 正確な値はまだ明確ではない. REDGによって低下した後の活性化エネルギーはその電流密度により異なり, $I = 0.5$ A/cm²では, $E_{\text{act}} - \Delta E = 0.25$ eV,

$I = 10 \text{ A/cm}^2$ では、 $E_{\text{act}} - \Delta E \approx 0 \text{ eV}$ と報告されている⁵⁶。このことから、パワーデバイスの順方向動作のような電流密度が高い条件下においては、Si-Core 部分転位の移動には活性化障壁が存在しないと考えられる。一方で、 30° C-Core については、完全転位の活性化エネルギーは動きの遅い部分転位 (trailing partial) の活性化エネルギーに一致することから、延性脆性遷移温度に関する実験結果より $E_{\text{act}} = 2.5 \text{ eV}$ ⁵⁷ 程度であると推定されている。しかしながら、実験で直接測定された例は報告されていない。また、光照射の実験において $r(I)$ は照射強度 I に比例することが示されている⁵⁸。ただし、キャリア流入の場合についての研究例は報告されていない。

2.4.4. 積層欠陥拡大の駆動力

① 電気的なエネルギーの変化による解釈と提案されているモデル

REDG は転位移動の活性化エネルギーを大幅に下げ、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。そのため、他の材料では REDG においてもその駆動力はせん断応力であるとされる^{48,52}。しかしながら、4H-SiC では REDG 下においても、その主な駆動力がせん断応力でないことが実験的に報告されている⁴¹。そのため、温度や電流密度による積層欠陥の拡大/縮小の現象の切り代わりといった順方向劣化現象における大きな特徴を説明可能な、転位移動の駆動力の解明やそのモデル化が大きな課題となっている。

積層欠陥の拡大/縮小を説明可能なせん断応力によらない部分転位の移動を説明するモデルについては、電気的なエネルギー準位に注目したモデル化が提案されている。4H-SiC に積層欠陥が1層含まれる場合のエネルギーダイアグラムを Fig. 2.10 に示す。4H-SiC に積層欠陥が1層含まれる場合、積層構造の周囲は 3C-SiC と同様の積層構造となる。この時、積層構造の伝導帯の下端のエネルギー準位は周囲のバルク領域に比べ約 0.3eV 低い量子井戸

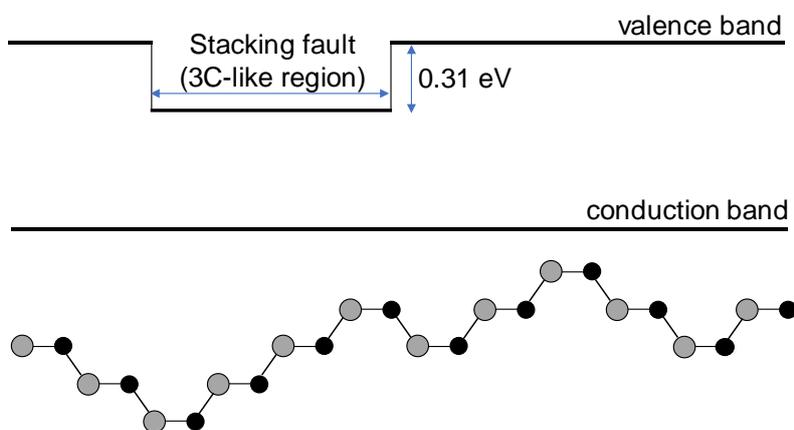


Fig. 2.10. A simple quantum-well energy band structure for the region containing a stacking fault.

構造⁵⁹を形成することがわかっている。この量子井戸構造に注目することにより、積層欠陥の拡大/縮小を解釈するモデルが大きく分けて2つ提案されている。

1つ目が、Caldwell⁶⁰や Pirouz⁶¹らにより提案されている「擬フェルミ準位の変化」に基づくモデルである。擬フェルミ準位は、外部電圧や光の照射により熱平衡状態から逸脱した場合の電子、正孔それぞれのフェルミ準位（そのエネルギーにおける専有確率が1/2となる準位）を示す用語である。この「擬フェルミ準位モデル」ではデバイスに電圧が印加され電子の擬フェルミ準位が積層欠陥のエネルギー準位を上回った場合に、積層欠陥が存在することにより結晶全体のエネルギーが低下するため積層欠陥拡大の駆動力となると解釈されている。一方で、擬フェルミ準位が積層欠陥のエネルギー準位よりも低い場合には、積層欠陥エネルギーにより平衡位置まで積層欠陥は収縮する。電圧や温度により擬フェルミ準位は変化するため、このモデルにより積層欠陥の拡大/縮小は定性的に説明可能であるとされる。しかしながら、これまでにその定量化に関する報告はなされていないのが現状である。

もう一つのモデルが、積層欠陥に電子がトラップされる事によりエネルギーが低下するとするモデルである。このモデルでは、積層欠陥拡大の駆動力はキャリアトラップによる積層欠陥エネルギーの変化で説明される^{39,40,51,52,62-64}。このモデルでは、系全体のエネルギー低下を、電流印加や光照射により励起された多数の電子が積層欠陥の量子井戸に移動することによってモデル化している。Fig. 2.11 にキャリアトラップの様式図を示す。電流注入や光照射などで荷電帯に生じた電子は、エネルギー準位が低い積層欠陥の量子井戸に捕獲されることにより、系全体の電気的なエネルギーが低下する。この量子井戸へとキャリアが補足されることによりエネルギーが低下するとするモデルは量子井戸効果（Quantum well action; QWA）モデルとも呼ばれ、このQWAによる実行的な積層欠陥エネルギーの変化が積層欠陥拡大/縮小の駆動力となると考えられている^{39,40,64,65}。結晶構造の不整合から与えられる積層欠陥エネルギーよりもQWAによるエネルギーの低下が大きい場合、電流印加時には

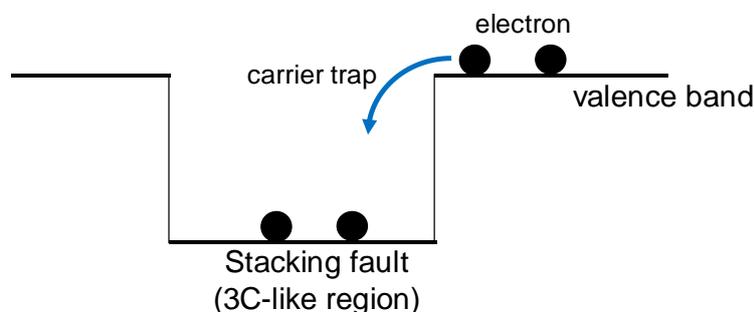


Fig. 2.11. Schematic diagram of carrier trapping due to quantum well of stacking fault. The electrons in the valence band are trapped in the quantum well, which lowers the energy of the whole system. In reality, it is necessary to consider the bending of the band structure due to the concentration of carriers.

積層欠陥が拡大する方が系全体のエネルギーは低い状態となる。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。一方で QWA によるエネルギーの低下よりも積層欠陥エネルギーの方が大きい場合には、積層欠陥エネルギーは正となり拡大した積層欠陥が縮小する駆動力となる。キャリアトラップによるエネルギー低下量については近年、理論計算に基づく定量化が行なわれている^{39,40}。

② QWA と転位論に基づく積層欠陥拡大の駆動力のモデル化

この QWA モデルと転位論を組み合わせた場合の積層欠陥の駆動力のモデル化について説明する。2.4.2①で説明したように、積層欠陥が存在する場合、ある温度 T における転位の駆動力 $\tau_{\text{drv}}(T)$ は式(2.6)で示すように、外力による分解せん断応力 $\tau_{\text{ext}}^{\text{RSS}}$ 、積層欠陥エネルギー $\gamma_{\text{SF}}(T)$ 、および転位同士の相互作用力 $\tau_{\text{int}}^{\text{RSS}}$ の合計で表される。

$$\tau_{\text{drv}}(T) = \tau_{\text{ext}}^{\text{RSS}} + \tau_{\text{int}}^{\text{RSS}} - \frac{\gamma_{\text{SF}}(T)}{b}. \quad (2.6)$$

ただし、 b は部分転位のバーガースベクトルの大きさである。積層欠陥エネルギーは積層欠陥を縮小させる方向に働く力であるため、式中の符号は負となる。4H-SiC では実験により測定された $\gamma_{\text{SF}} = 14.7 \pm 2.5 \text{ mJ/m}^2$ が従来用いられている⁵。このとき、部分転位の拡張幅は、30 nm（完全らせん転位）～70 nm（完全刃状転位）である⁵。幾何学的な関係より、4H-SiC 結晶の格子定数 a を用いて $b = a/\sqrt{3}$ と表すことができるため、 $a = 3.07 \text{ \AA}$ ⁶⁶ より $b = 0.177 \text{ nm}$ と求めることができる。積層欠陥エネルギーに実験値を用いると、積層欠陥エネルギーによる収縮力は $\gamma/b = 83 \text{ MPa}$ 程度と見積もられる。しかしながら、この実験値は1300 °Cにおける測定値であるため、順方向劣化が生じるデバイスの動作温度である室温～300 °C程度の低温領域においても同じとは限らない^{45,46}。そのため、本研究では第5章で積層欠陥エネルギーの温度依存性について第一原理計算を用いた計算を行う。

デバイスに順方向電圧を印加した場合、QWA 効果によるエネルギー利得 $\Delta\gamma$ は活性化された電子の数に相当する少数キャリア密度 ρ と温度 T の関数として与えられる^{39,40}。このとき、実行的な積層欠陥エネルギー γ_{SF}^* は次の式(2.7)で表される。

$$\gamma_{\text{SF}}^*(\rho, T) = \gamma_{\text{SF}}(T) - \Delta\gamma(\rho, T), \quad (2.7)$$

式(2.6)、(2.7)より、順方向劣化時の転位の駆動力 τ^* は

$$\tau_{\text{drv}}^*(\rho, T, \tau_{\text{ext}}^{\text{RSS}}) = \tau_{\text{ext}}^{\text{RSS}} + \tau_{\text{int}}^{\text{RSS}} + \frac{\Delta\gamma(\rho, T)}{b} - \frac{1}{b}\gamma_{\text{SF}}(T), \quad (2.8)$$

と与えられる。積層欠陥がある程度拡大すると、部分転位間相互作用力 τ_{int} が与える影響は非常に小さく無視できるため、QWA モデルに基づく積層欠陥拡大、縮小の判定は、 γ_{SF}^* ($= b\tau_{\text{drv}}^*$)を用いて、

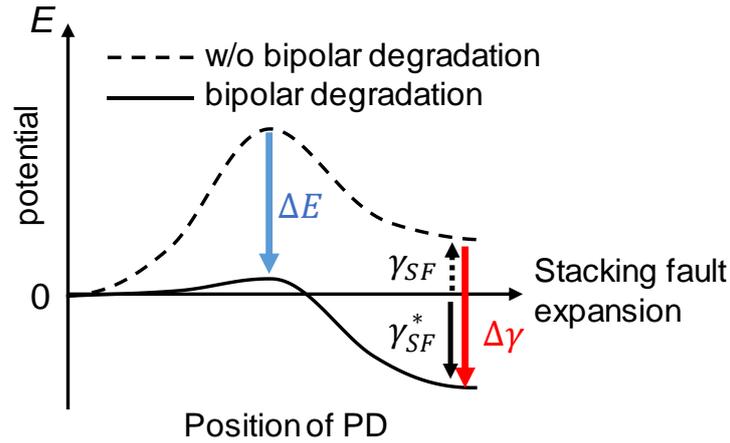


Fig. 2.12. Schematic diagram of energy level change when dislocations move over one Peierls barrier. During the bipolar degradation, the activation barrier of dislocation movement E_{act} is reduced by ΔE because of REDG, and the energy level after stacking fault expansion is reduced by $\Delta\gamma$ because of QWA. Please note that the diagram is simplified for explanation. The actual energy change is obtained by multiplying the change in stacking fault energy by the distance between Peierls barriers and the dislocation length.

$$\gamma_{SF}^* = b\tau_{ext}^{rss} + \gamma_{SF}(T) - \Delta\gamma(\rho, T), \quad (2.9)$$

の符号により決定することができる。 γ_{SF}^* が正である場合には積層欠陥は拡大し、負である場合には積層欠陥は縮小する。

Fig. 2.12 に、パイエルス障壁を一つだけ乗り越える場合の転位の移動に伴うエネルギー準位変化について、順方向劣化現象有無による比較を示す。順方向劣化現象中は、REDG の効果により転位移動の活性化障壁が ΔE だけ、QWA の効果により積層欠陥拡大後のエネルギー準位が $\Delta\gamma$ だけ低下する。そのため、順方向劣化の原因となっている積層欠陥の急速、自発的な拡大は、REDG と QWA の両者が組み合わさる事により初めて生じているものと考えられる。ただし、図は説明のため単純化されているため、実際には移動後のエネルギー変化量は単位面積当たりのエネルギーである積層欠陥エネルギーの変化にパイエルス障壁間の距離と転位の長さをかけたものとなる。

また、式(2.8)を式(2.5)に代入することにより電流印加時の転位の移動速度（積層欠陥の拡大速度）に関して以下の式が得られる。

$$v = A_0 \left(\left[\tau_{ext}^{rss} + \tau_{int}^{rss} - \frac{\gamma_{SF}(T) - \Delta\gamma(\rho, T)}{b} \right] / \tau_0 \right)^m \left\{ \exp\left(\frac{-E_{act}}{k_B T}\right) + r(I) \exp\left(\frac{-(E_{act} - \Delta E)}{k_B T}\right) \right\}. \quad (2.10)$$

式(2.10)において、室温では $\exp\{-E_{th}/k_B T\}$ は十分小さいことから、

$$v \approx A_0 \left(\left[\tau_{\text{ext}}^{\text{rss}} + \tau_{\text{int}}^{\text{rss}} - \frac{\gamma_{\text{SF}}(T) - \Delta\gamma(\rho, T)}{b} \right] / \tau_0 \right)^m r(I) \exp\left(\frac{-(E_{\text{act}} - \Delta E)}{k_B T}\right), \quad (2.11)$$

として、さらに式変形を行うと順方向劣化時の転位の移動速度の式、

$$v = \frac{A_0}{\tau_0^m} \left\{ \tau_{\text{ext}}^{\text{rss}} + \tau_{\text{int}}^{\text{rss}} - \frac{\gamma_{\text{SF}}(T) - \Delta\gamma(\rho, T)}{b} \right\}^m r(I) \exp\left(\frac{-(E_{\text{act}} - \Delta E)}{k_B T}\right), \quad (2.12)$$

が得られる。

③ 提案されている対策（再結合促進層）

式(2.9)に基づくと、帯状欠陥の拡大起点であるエピ/サブ界面の少数キャリア密度を低減させることにより、積層欠陥の拡大を抑制することが可能となる。このコンセプトに基づき、順方向劣化現象を抑制するためのデバイス構造として、再結合促進層の導入が提案されている。これは、エピタキシャル成長層と基板の間に再結合促進層と呼ばれるキャリア寿命を低下させる層を導入することにより、エピ/サブ界面の少数キャリア密度を低減させる構造である。Tawara らの研究⁶⁷では、膜厚 10 μm 、N ドープ密度 $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ の再結合促進層を導入することにより、積層結果の拡大を抑制可能であることが報告されている。しかしながら、再結合促進層の導入は製造コストの増加にも繋がるため、より効率的な設計のためにも、式(2.9)に基づく定量的なモデル化が求められている。

2.5. ラマン分光法による半導体の応力解析

2.5.1. ラマン分光法の基礎概念

半導体の様々な分析に用いられるラマン分光法について、その古典論を用いて基礎概念を説明する。入射光を平面電磁波として扱うと、その電場ベクトル \mathbf{E}_i は

$$\mathbf{E}_i = E_i \mathbf{e}_i \cos \omega_i t, \quad (2.13)$$

と表される。但し、 \mathbf{E}_i 、 \mathbf{e}_i 、 ω_i はそれぞれ入射光の振幅、偏光ベクトル、角振動数である。ある原子の双極子モーメント $\boldsymbol{\mu}$ が電場 \mathbf{E}_i により励起されることを考えると、 $\boldsymbol{\mu}$ と \mathbf{E}_i は 2 階のテンソル $\boldsymbol{\alpha}$ を用いて、

$$\boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{\alpha} \mathbf{E}_i, \quad (2.14)$$

と表すことができる。この 2 階のテンソル $\boldsymbol{\alpha}$ は分極率と呼ばれる。式(2.13)と(2.14)より、 $\boldsymbol{\mu}$ は

$$\boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{\alpha} E_i \mathbf{e}_i \cos \omega_i t, \quad (2.15)$$

と表される。

次に、原子の振動を考える。原子の振動 Q を基準座標で表される基準振動 Q_k の一次結合で表すと、原子の振動による分極率テンソルの成分 $\alpha_{\rho\sigma}$ ($\rho, \sigma = x, y, z$) の変化は1次の項までを考えると次のように与えられる。

$$\alpha_{\rho\sigma} = (\alpha_0)_{\rho\sigma} + \sum_k \left(\frac{\partial \alpha_{\rho\sigma}}{\partial Q_k} \right)_0 Q_k. \quad (2.16)$$

但し、 $(\alpha_0)_{\rho\sigma}$ は電子核が平衡位置にある時の分極率、 $(\partial \alpha_{\rho\sigma} / \partial Q_k)_0$ は原子核が平衡位置にある時の分極率成分 $\alpha_{\rho\sigma}$ の k 番目の基準座標による微係数である。基準振動 Q_k の角振動数を ω_k と表すと、

$$Q_k = Q_{k0} \cos \omega_k t, \quad (2.17)$$

より、

$$\alpha_{\rho\sigma} = (\alpha_0)_{\rho\sigma} + \sum_k \left\{ \left(\frac{\partial \alpha_{\rho\sigma}}{\partial Q_k} \right)_0 Q_{k0} \right\} \cos \omega_k t, \quad (2.18)$$

が得られる。よって、式(2.15), (2.18)より、

$$\begin{aligned} \mu_\rho &= \sum_\sigma \left[\alpha(\alpha_0)_{\rho\sigma} + \sum_k \left\{ \left(\frac{\partial \alpha_{\rho\sigma}}{\partial Q_k} \right)_0 Q_{k0} \right\} \cos \omega_k t E_i e_{i\sigma} \cos \omega_i t \right] \\ &= \sum_\sigma \alpha(\alpha_0)_{\rho\sigma} + \frac{1}{2} \sum_\sigma \sum_k \left\{ \left(\frac{\partial \alpha_{\rho\sigma}}{\partial Q_k} \right)_0 Q_{k0} \right\} E_i e_{i\sigma} [\cos(\omega_i - \omega_k) t + \cos(\omega_i + \omega_k) t], \end{aligned} \quad (2.19)$$

が得られる。式(2.19)より、双極子モーメントは角振動数 ω_i に加え、角振動数 $\omega_i - \omega_k$, $\omega_i + \omega_k$ で振動することがわかる。よって、双極子モーメント振動により放射される電磁波にも入射光と同じ角振動数 ω_i に加え、角振動数 $\omega_i - \omega_k$, $\omega_i + \omega_k$ の成分が含まれる。この振動数が変化した散乱光をラマン散乱と呼び、 $\omega_i - \omega_k$ の成分をストークス散乱、 $\omega_i + \omega_k$ の成分をアンチストークス散乱と呼ぶ。また、角振動数が入射光と同じ ω_i の成分はレイリー散乱と呼ばれている。ラマン散乱で得られる材料の振動数 ω_k はラマンシフトと呼ばれる。式(2.17)からわかるようにラマン散乱が観測されるためには、 $(\partial \alpha_{\rho\sigma} / \partial Q_k)_0 \neq 0$ が条件となる。この条件を満たす基準振動がラマン分光で測定され、一般にラマン活性と呼ばれる。結晶ではラマン活性な基準振動（フォノンモード）は結晶の対称性に基づいて決定可能であり、全ての点群について明らかとなっている⁶⁸。

結晶における基準振動はフォノンに対応する。フォノンの波数ベクトルを \mathbf{q} 、フォノン振動数を $\omega(\mathbf{q})$ 、入射光の波数ベクトルを \mathbf{k}_i とすると、ラマン散乱光の波数ベクトル \mathbf{k}_s と角振動数 ω_s は保存則より

$$\mathbf{k}_s = \mathbf{k}_i \pm \mathbf{q}, \quad (2.20)$$

$$\omega_s = \omega_i \pm \omega(\mathbf{q}). \quad (2.21)$$

と表すことができる。ラマン分光に使われる光の波長は数百 nm 程度と非常に長いので、ラマン散乱に寄与するフォノンには $\mathbf{q} \approx 0$, すなわち Γ 点近傍のフォノンに限られる。そのため、半導体のような結晶材料にラマン分光法を用いて得られるラマンシフトは Γ 点近傍の光学フォノンの振動数となる。

2.5.2. ラマン分光法を用いた半導体の応力分布の測定

ラマン分光法で測定される Γ 点近傍の光学フォノンの振動数はひずみにより変動する。そのため、無応力状態のラマンシフト（フォノン振動数）を基準にラマンシフトの変動量を測定することにより、半導体のひずみ分布を測定することが可能である。また、弾性定数を用いてひずみと応力を変換することにより、応力分布の測定も可能である。シリコンのようなダイヤモンド構造や 3C-SiC のような閃亜鉛鉱型構造では、単位構造に含まれる原子が 2 個しかないのでダイナミカルマトリクスから直接ひずみと振動数変化の関係を求めることが可能であり⁶⁹、ラマン分光法を用いた応力解析が多く報告されている^{70,71,80,72-79}。一方、ウルツ鉱型や 4H-SiC のような単位構造に多くの原子が含まれる構造ではダイナミカルマトリクスを直接解くことは事実上不可能である。そのため、応力テンソルとフォノン振動数変化の関係はフォノン変形ポテンシャルを用いて結晶の対称性から導出される。ウルツ鉱型や 4H-SiC が含まれる六方対称の C_{6v} 結晶では以下の関係が得られている⁸¹。

$$\Delta\omega_{A_1} = a_{A_1}(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) + b_{A_1}\sigma_{zz}, \quad (2.22)$$

$$\Delta\omega_{E_1} = a_{E_1}(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) + b_{E_1}\sigma_{zz} \pm c_{E_1}[(\sigma_{xx} - \sigma_{yy})^2 + 4\tau_{xy}^2]^{1/2}, \quad (2.23)$$

$$\Delta\omega_{E_2} = a_{E_2}(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) + b_{E_2}\sigma_{zz} \pm c_{E_2}(\sigma_{xx} - \sigma_{yy})^2 + 4\tau_{xy}^2]^{1/2}. \quad (2.24)$$

ここで、 a_i, b_i, c_i ($i = A_1, E_1, E_2$) はフォノン変形ポテンシャル係数と呼ばれる物質依存の値であり、第3章では 4H-SiC のフォノン変形ポテンシャル係数を第一原理計算により求める。

ラマン分光法を用いた応力分布の測定の一つの課題が、応力成分の分解である。式(2.23)と(2.24)からわかるように、 E_1 モードと E_2 モードの変形ポテンシャルは同じ形式をしているため、応力解析において独立に用いることができるのは $\Delta\omega_{E_1}$ と $\Delta\omega_{E_2}$ のどちらかと $\Delta\omega_{A_1}$ の合計2つのみである。そのため、6成分ある応力テンソルを独立に評価することはできない。この課題を克服するため、シリコンデバイス等では応力分布を成分毎に明らかにする手法として、ラマン分光法と有限要素法 (FEM) 解析を組み合わせる解析が実施されている⁷³⁻⁷⁷。第4章では、このラマン分光法と FEM 解析を組み合わせた応力解析手法を 4H-SiC パワーデバイスに適用する方法の構築を行う。

2.6. デバイスシミュレーション

半導体デバイスの電氣的な特性に関するシミュレーション技術は、プロセスシミュレーション、デバイスシミュレーション、回路シミュレーションの3種類に大別され、これらはまとめて Technology CAD (TCAD) と呼ばれている。これらのうち、デバイス動作に関する電気特性の解析を担うのがデバイスシミュレーションである。

デバイスシミュレーション⁸²⁻⁸⁷では、ポテンシャルの空間分布を求めるポアソン方程式とポテンシャル分布によるキャリアの輸送を求めるボルツマン輸送方程式の2つが支配方程式となる。これらは相互に影響するため、シミュレーションで両者を収束計算により自己無撞着的に計算を行う (Fig. 2.12.)。

ポアソン方程式は式(2.25)で与えられる。

$$\text{div}(\epsilon \text{grad} \psi) = -q(N_D^+ - N_A^- + p - n). \quad (2.25)$$

ここで、 ϵ 、 ψ はそれぞれ誘電率、ポテンシャルを示す。また、 N_D^+ 、 N_A^- はそれぞれイオン化ドナー密度、イオン化アクセプタ密度を、 p 、 n はホールと電子の密度である。ポアソン方程式を解くことにより、印加した電圧と電荷によるポテンシャルの空間分布を求めることができる。

一方、ボルツマン輸送方程式は次の式(2.26)、

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} + \frac{\mathbf{F}}{m} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{coll}}, \quad (2.26)$$

で与えられる。但し、 f 、 \mathbf{v} 、 \mathbf{F} はそれぞれキャリアの分布関数、速度、外力である。また、右辺は粒子の衝突等による分布関数の時間変化を示す。式(2.26)のボルツマン輸送方程式を解くことによりキャリア密度分布や電流密度分布を求めることができる。このボルツマン輸送方程式をモンテカルロ法を用いて直接解くモンテカルロ・デバイスシミュレーションは、バンド構造や散乱項のモデル化以外の他の近似が不要であり、またキャリアのミクロな運動を明らかにすることが可能である。しかしながら、計算負荷が非常に高いため、デバイスの電気特性をシミュレーションする場合にはこれをマクロに近似したドリフト拡散モデルが一般的に用いられる。

式(2.26)に対して、物質保存則、運動力保存則を仮定して式変形を行う^{85,87}ことにより、ドリフト拡散方程式、

$$\frac{\partial n}{\partial t} - \text{div} \left(\frac{\mathbf{J}_n}{q} \right) = U, \quad (2.27)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} - \text{div} \left(\frac{\mathbf{J}_p}{q} \right) = U, \quad (2.28)$$

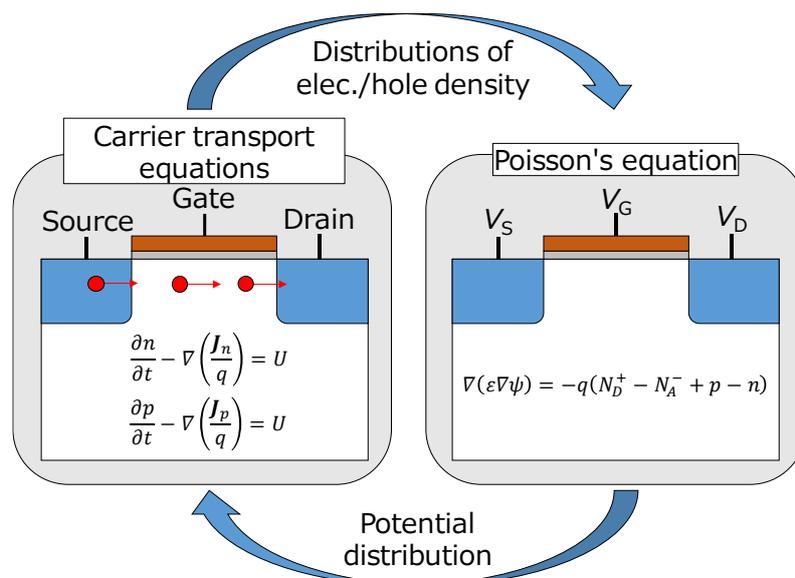


Fig. 2.13. The basic framework of the device simulation.

が得られる。但し、 J_n 、 J_p はそれぞれ電子、正孔の電流密度、 U はキャリアの生成・再結合頻度を示す。式(2.25)、(2.27)、(2.28)を n 、 p 、 ψ について解くことにより、デバイスシミュレーションが行われる。式(2.26)を直接解くモンテカルロ・デバイスシミュレーションが個々の粒子の運動に注目していることから粒子モデルと呼ばれるのに対し、ドリフト拡散方程式に基づくモデルは連続流体モデルと呼ばれる。実際のシミュレーションでは材料やプロセスに依存したパラメータとして、キャリアの移動度や生成・消滅頻度（キャリア寿命）、バンドギャップ等の値が必要となる。第6章ではまず、4H-SiCのデバイスシミュレーションに必要なこれらの物理パラメータについて検討を行う。

本章の参考文献

- ¹ Y.M. Tairov and V.F. Tsvetkov, J. Cryst. Growth **43**, 209 (1978).
- ² Y.M. Tairov and V.F. Tsvetkov, J. Cryst. Growth **52**, 146 (1981).
- ³ 松波弘之, 応用物理 **59**, 1051 (1990).
- ⁴ S. Limpijumngong and W.R.L. Lambrecht, Phys. Rev. B **57**, 12017 (1998).
- ⁵ M.H. Hong, A. V. Samant, and P. Pirouz, Philos. Mag. A **80**, 919 (2000).
- ⁶ H. Iwata, U. Lindefelt, S. Öberg, and P.R. Briddon, Mater. Sci. Forum **389–393**, 439 (2002).
- ⁷ U. Lindefelt, H. Iwata, S. Öberg, and P.R. Briddon, Phys. Rev. B **67**, 155204 (2003).

- ⁸ T. Kimoto, *Jpn. J. Appl. Phys.* **54**, 040103 (2015).
- ⁹ T. Kimoto, A. Iijima, H. Tsuchida, T. Miyazawa, T. Tawara, A. Otsuki, T. Kato, and Y. Yonezawa, *2017 IEEE Int. Reliab. Phys. Symp. 2A* (2017).
- ¹⁰ S. Ha, P. Mieszkowski, M. Skowronski, and L.B. Rowland, *J. Cryst. Growth* **244**, 257 (2002).
- ¹¹ T. Ohno, H. Yamaguchi, S. Kuroda, K. Kojima, T. Suzuki, and K. Arai, *J. Cryst. Growth* **260**, 209 (2004).
- ¹² W. Chen and M.A. Capano, *J. Appl. Phys.* **98**, 114907 (2005).
- ¹³ Z. Zhang and T.S. Sudarshan, *Appl. Phys. Lett.* **87**, 1 (2005).
- ¹⁴ H. Tsuchida, M. Ito, I. Kamata, and M. Nagano, *Phys. Status Solidi Basic Res.* **246**, 1553 (2009).
- ¹⁵ H. Song and T.S. Sudarshan, *J. Cryst. Growth* **371**, 94 (2013).
- ¹⁶ H. Tsuchida, I. Kamata, T. Miyazawa, M. Ito, X. Zhang, and M. Nagano, *Mater. Sci. Semicond. Process.* **78**, 2 (2018).
- ¹⁷ S. Hayashi, T. Naijo, T. Yamashita, M. Miyazato, M. Ryo, H. Fujisawa, M. Miyajima, J. Senzaki, T. Kato, Y. Yonezawa, K. Kojima, and H. Okumura, *Appl. Phys. Express* **10**, 081201 (2017).
- ¹⁸ S. Hayashi, T. Yamashita, J. Senzaki, M. Miyazato, M. Ryo, M. Miyajima, T. Kato, Y. Yonezawa, K. Kojima, and H. Okumura, *Jpn. J. Appl. Phys.* **57**, 04FR07 (2018).
- ¹⁹ S. Hayashi, T. Yamashita, J. Senzaki, T. Kato, Y. Yonezawa, K. Kojima, and H. Okumura, *Appl. Phys. Express* **12**, 051007 (2019).
- ²⁰ A. Iijima, I. Kamata, H. Tsuchida, J. Suda, and T. Kimoto, *Philos. Mag.* **97**, 2736 (2017).
- ²¹ H. Matsuhata and T. Sekiguchi, *Philos. Mag.* **98**, 878 (2018).
- ²² S. Ha, M. Benamara, M. Skowronski, and H. Lendenmann, *Appl. Phys. Lett.* **83**, 4957 (2003).
- ²³ H. Idrissi, B. Pichaud, G. Regula, and M. Lancin, *J. Appl. Phys.* **101**, 113533 (2007).
- ²⁴ M. Skowronski, J.Q. Liu, W.M. Vetter, M. Dudley, C. Hallin, and H. Lendenmann, *J. Appl. Phys.* **92**, 4699 (2002).
- ²⁵ Y. Sun, S. Izumi, S. Sakai, K. Yagi, and H. Nagasawa, *Phys. Status Solidi Basic Res.* **249**, 555 (2012).
- ²⁶ J. Yang, S. Izumi, R. Muranaka, Y. Sun, S. Hara, and S. Sakai, *Mech. Eng. J.* **2**, 15 (2015).
- ²⁷ M. Skowronski and S. Ha, *J. Appl. Phys.* **99**, 011101 (2006).
- ²⁸ H. Lendenmann, F. Dahlquist, N. Johansson, R. Söderholm, P.Å. Nilsson, P. Bergman, and P. Skytt, *Mater. Sci. Forum* **353–356**, 727 (2001).
- ²⁹ P. Bergman, H. Lendenmann, P.Å. Nilsson, U. Lindefelt, and P. Skytt, *Mater. Sci. Forum* **353–356**, 299 (2001).
- ³⁰ 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, *J. Appl. Phys.* **119**, 095711 (2016).
- ³¹ J.D. Caldwell, R.E. Stahlbush, K.D. Hobart, O.J. Glembocki, and K.X. Liu, *Appl. Phys. Lett.* **90**, 10 (2007).

- ³² J.D. Caldwell, K.X. Liu, M.J. Tadjer, O.J. Glembocki, R.E. Stahlbush, K.D. Hobart, and F. Kub, *J. Electron. Mater.* **36**, 318 (2007).
- ³³ J.D. Caldwell, O.J. Glembocki, R.E. Stahlbush, and K.D. Hobart, *J. Electron. Mater.* **37**, 699 (2008).
- ³⁴ N.A. Mahadik, R.E. Stahlbush, J.D. Caldwell, and K.D. Hobart, *Mater. Sci. Forum* **717–720**, 391 (2012).
- ³⁵ T. Miyanagi, H. Tsuchida, I. Kamata, T. Nakamura, K. Nakayama, R. Ishii, and Y. Sugawara, *Appl. Phys. Lett.* **89**, (2006).
- ³⁶ A. Okada, J. Nishio, R. Iijima, C. Ota, A. Goryu, M. Miyazato, M. Ryo, T. Shinohe, M. Miyajima, T. Kato, Y. Yonezawa, and H. Okumura, *Jpn. J. Appl. Phys.* **57**, 061301 (2018).
- ³⁷ T. Tawara, S. Matsunaga, T. Fujimoto, M. Ryo, M. Miyazato, T. Miyazawa, K. Takenaka, M. Miyajima, A. Otsuki, Y. Yonezawa, T. Kato, H. Okumura, T. Kimoto, and H. Tsuchida, *J. Appl. Phys.* **123**, 025707 (2018).
- ³⁸ A. Goryu, A. Kano, M. Kato, C. Ota, A. Okada, J. Nishio, S. Izumi, and K. Hirohata, *Mater. Sci. Forum* **963**, 288 (2019).
- ³⁹ Y. Mannen, K. Shimada, K. Asada, and N. Ohtani, *J. Appl. Phys.* **125**, 085705 (2019).
- ⁴⁰ A. Iijima and T. Kimoto, *J. Appl. Phys.* **126**, 105703 (2019).
- ⁴¹ S. Ha, M. Skowronski, J.J. Sumakeris, M.J. Paisley, and M.K. Das, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 175504 (2004).
- ⁴² P. Pirouz, J.L. Demenet, and M.H. Hong, *Philos. Mag. A* **81**, 1207 (2001).
- ⁴³ I. Yonenaga, *Eng. Fract. Mech.* **147**, 468 (2015).
- ⁴⁴ P.M. Anderson, J.P. Hirth, and J. Lothe, *Theory of Dislocations*, 3rd ed. (Cambridge University Press, Cambridge, 2017).
- ⁴⁵ W.J. Moon, T. Umeda, and H. Saka, *Philos. Mag. Lett.* **83**, 233 (2003).
- ⁴⁶ H. Iwata, M. Kutsuna, T. Okuno, and H. Saka, *Philos. Mag. Lett.* **96**, 265 (2016).
- ⁴⁷ L. Kubin, *Dislocations, Mesoscale Simulations and Plastic Flow* (Oxford University Press, Oxford, 2013).
- ⁴⁸ K. Maeda and S. Takeuchi, in *Dislocations in Solids*, edited by F.R.N. Nabarro and M.S. Duesbery (Elsevier, Amsterdam, 1996), pp. 443–504.
- ⁴⁹ H. Idrissi, G. Regula, M. Lancin, J. Douin, and B. Pichaud, *Phys. Status Solidi* **2**, 1998 (2005).
- ⁵⁰ H. Idrissi, M. Lancin, G. Regula, and B. Pichaud, *Mater. Sci. Forum* **457–460**, 355 (2004).
- ⁵¹ K. Maeda, *MRS Proc.* **1195**, 1195 (2009).
- ⁵² K. Maeda, in *Mater. Reliab. Handb. Semicond. Opt. Electron Devices*, edited by O. Ueda and S.J. Pearton (Springer, New York, 2013), pp. 263–281.
- ⁵³ R. Hirano, Y. Sato, H. Tsuchida, M. Tajima, K.M. Itoh, and K. Maeda, *Appl. Phys. Express* **5**, 091302 (2012).
- ⁵⁴ 平野梨伊, 4H-SiC 中の転位のフォトルミネッセンス解析, 慶応義塾大学, 2013.
- ⁵⁵ Y. Tokuda, I. Kamata, N. Hoshino, T. Kato, H. Okumura, T. Kimoto, and H. Tsuchida, *J. Cryst.*

Growth **468**, 889 (2017).

- ⁵⁶ A. Galeckas, J. Linnros, and P. Pirouz, *Appl. Phys. Lett.* **81**, 883 (2002).
- ⁵⁷ P. Pirouz, M. Zhang, J.L. Demenet, and H.M. Hobgood, *J. Appl. Phys.* **93**, 3279 (2003).
- ⁵⁸ R. Hirano, Y. Sato, M. Tajima, K.M. Itoh, and K. Maeda, *Mater. Sci. Forum* **717–720**, 395 (2012).
- ⁵⁹ M.S. Miao, S. Limpijumnong, and W.R.L. Lambrecht, *Appl. Phys. Lett.* **79**, 4360 (2001).
- ⁶⁰ J.D. Caldwell, R.E. Stahlbush, M.G. Ancona, O.J. Glembocki, and K.D. Hobart, *J. Appl. Phys.* **108**, 044503 (2010).
- ⁶¹ P. Pirouz, *Phys. Status Solidi* **210**, 181 (2013).
- ⁶² K. Maeda, R. Hirano, Y. Sato, and M. Tajima, *Mater. Sci. Forum* **725**, 35 (2012).
- ⁶³ J.Q. Liu, H.J. Chung, T. Kuhr, Q. Li, and M. Skowronski, *Appl. Phys. Lett.* **80**, 2111 (2002).
- ⁶⁴ C. Taniguchi, A. Ichimura, N. Ohtani, M. Katsuno, T. Fujimoto, S. Sato, H. Tsuge, and T. Yano, *J. Appl. Phys.* **119**, 145704 (2016).
- ⁶⁵ T.A. Kuhr, J. Liu, H.J. Chung, M. Skowronski, and F. Szmulowicz, *J. Appl. Phys.* **92**, 5863 (2002).
- ⁶⁶ Y. Goldberg, M.E. Levinshtein, and S.L. Rumyantsev, in edited by M.E. Levinshtein, S.L. Rumyantsev, and M.S. Shur (John Wiley & Sons, Inc., New York, 2001), pp. 93–148.
- ⁶⁷ 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, *J. Appl. Phys.* **120**, 115101 (2016).
- ⁶⁸ R. Loudon, *Adv. Phys.* **50**, 813 (2001).
- ⁶⁹ S. Ganesan, A. Maradudin, and J. Oitmaa, *Ann. Phys. (N. Y.)* **56**, 556 (1970).
- ⁷⁰ I. De Wolf, H.E. Maes, and S.K. Jones, *J. Appl. Phys.* **79**, 7148 (1996).
- ⁷¹ I. De Wolf, *Semicond. Sci. Technol.* **11**, 139 (1996).
- ⁷² I. De Wolf, C. Jian, and W.M. van Spengen, *Opt. Lasers Eng.* **36**, 213 (2001).
- ⁷³ M. Yoshikawa, M. Maegawa, G. Katagiri, and H. Ishida, *J. Appl. Phys.* **78**, 941 (1995).
- ⁷⁴ E. Bonera, M. Fanciulli, and G. Carnevale, *J. Appl. Phys.* **100**, 033516 (2006).
- ⁷⁵ T. Tada, V. Poborchii, and T. Kanayama, *J. Appl. Phys.* **107**, 113539 (2010).
- ⁷⁶ V. Senez, A. Armigliato, I. De Wolf, G. Carnevale, R. Balboni, S. Frabboni, and A. Benedetti, *J. Appl. Phys.* **94**, 5574 (2003).
- ⁷⁷ A. Yagishita, T. Saito, S. Matsuda, and Y. Ushiku, *Jpn. J. Appl. Phys.* **36**, 1335 (1997).
- ⁷⁸ R. Sugie, K. Kosaka, H. Seki, H. Hashimoto, and M. Yoshikawa, *J. Appl. Phys.* **114**, 233503 (2013).
- ⁷⁹ W.L. Zhu, J.L. Zhu, S. Nishino, and G. Pezzotti, *Appl. Surf. Sci.* **252**, 2346 (2006).
- ⁸⁰ M. Yoshikawa, K. Kosaka, H. Seki, and T. Kimoto, *Appl. Spectrosc.* **70**, 1209 (2016).
- ⁸¹ R.J. Briggs and A.K. Ramdas, *Phys. Rev. B* **13**, 5518 (1976).
- ⁸² 佐野伸行, *応用物理* **71**, 906 (2002).
- ⁸³ 松沢一也, *応用物理* **71**, 1161 (2002).
- ⁸⁴ 堀尾和重, *応用物理* **71**, 1286 (2002).

⁸⁵ 森伸也, 応用物理 **86**, 1075 (2018).

⁸⁶ 森伸也, 応用物理 **87**, 44 (2018).

⁸⁷ 山口憲 and 富澤一隆, 非平衡電子輸送論—半導体デバイスシミュレーション— (アドバンスソフト, Tokyo, 2011).

第3章 第一原理計算を用いたフォノン変形ポテンシャルの決定

3.1. 緒言

第2章で述べたように、4H-SiCの属する C_{6v}^4 空間群における応力とフォノン振動数変化の関係は、線形変形ポテンシャル理論¹により定式化できる。4H-SiCのフォノン変形ポテンシャル係数は一軸引張試験を用いてその一部が実験的に求められている^{2,3}。しかしながら、多軸応力やせん断応力が振動数変化に与える影響は明らかになっていない。本章では、4H-SiCの変形ポテンシャル係数の全成分を第一原理計算により理論的に求める。また、先行する実験結果との比較を通して計算結果の妥当性を議論する。

3.2. 計算手法

ラマン分光法で測定可能なフォノンモードは結晶の対称性により決定され、4H-SiCでは3つの A_1 モード、2重に縮退した3つの E_1 モード、2重に縮退した4つの E_2 モードがラマン活性となる⁴。Fig. 3.1にそれぞれの振動モードにおける原子の振動方向を示す。[2 $\bar{1}\bar{1}$ 0]方向を x 、[0001]方向を z と表現すると、 A_1 モードは z 軸方向の基準振動に、 E_1 モードと E_2 モードは xy 面内での基準振動に対応する。また、 E_1 モードと E_2 モードでは原子の振動の位相が異なっている。4H-SiCのような C_{6v}^4 空間群に属する結晶では、それぞれのフォノンモードでの振動数変化と応力との関係は、線形の範囲ではその対称性より次の式(3.1)~(3.3)で表される¹。ここで、 a_i 、 b_i 、 c_i ($i = A_1, E_1, E_2$) はフォノン変形ポテンシャル係数と呼ばれる物質依存の値である。この係数を第一原理計算により求める。

$$\Delta\omega_{A_1} = a_{A_1}(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) + b_{A_1}\sigma_{zz}, \quad (3.1)$$

$$\Delta\omega_{E_1} = a_{E_1}(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) + b_{E_1}\sigma_{zz} \pm c_{E_1}[(\sigma_{xx} - \sigma_{yy})^2 + 4\tau_{xy}^2]^{1/2}, \quad (3.2)$$

$$\Delta\omega_{E_2} = a_{E_2}(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) + b_{E_2}\sigma_{zz} \pm c_{E_2}[(\sigma_{xx} - \sigma_{yy})^2 + 4\tau_{xy}^2]^{1/2}. \quad (3.3)$$

$\Delta\omega_{E_1}$ 、 $\Delta\omega_{E_2}$ の右辺第三項は、結晶に xy 平面内のせん断ひずみがかかると、結晶の対称性が崩れるため、2重に縮退していた E_1 、 E_2 フォノンが2つの異なる振動数へと分裂することに対応している。

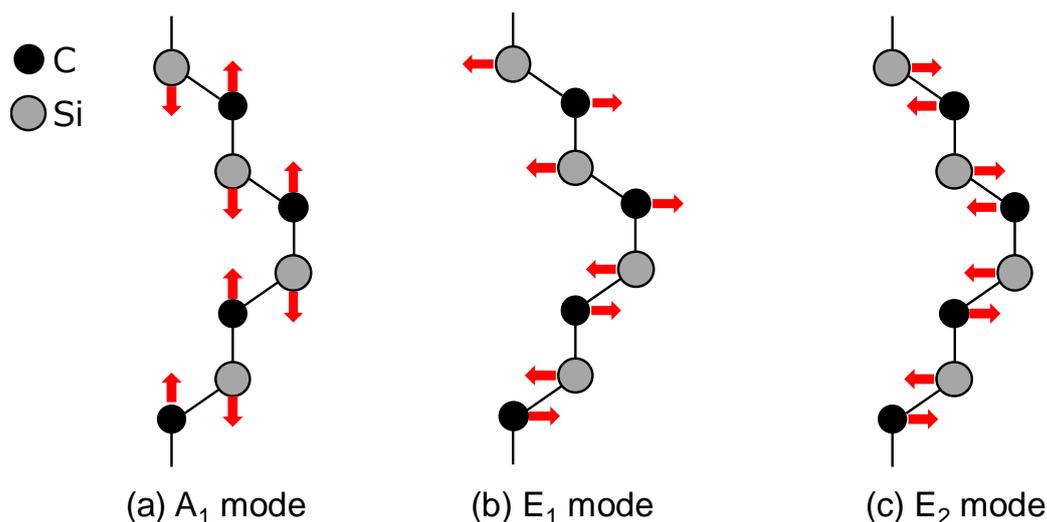


Fig. 3.1. Schematic illustrations of the atomic movements in each phonon mode.

Arrows indicate the movement directions of each atom.

数値計算は計算コードに `phase/05` を用いて密度汎関数法 (DFT) による計算を行った。擬ポテンシャルには Local Density Approximation (LDA) を用い、カットオフエネルギーは 36 Hartree とした。本計算に用いたユニットセルを Fig. 3.2 に示す。Si 4 個, C 4 個からなるユニットセルを解析対象とし, $12 \times 12 \times 4 k$ 点を Monkhorst-Pack 法により設定した。格子定数はエネルギー最小化計算により決定し, $a = 3.048 \text{ \AA}$, $c/a = 3.274$ であった。

本研究では弾性定数に第一原理計算により算出したものを用いる。線形弾性理論では、個々の原子の変位は結晶の変形に対して線形である、つまりアフィン変換によって記述可能であると仮定される。しかしながら、実際には各原子は変形後の格子において安定な位置へとさらに移動する。この線形弾性理論によって与えられた変位と原子の実際の変位の差は内部変位と呼ばれる⁶。そのため、本解析では各原子を安定位置へと移動させるためにまず変形させた単位格子でのエネルギー最小化計算を行った。エネルギー最小化後、ひずみと応力テンソルの関係から弾性定数を決定した。解析は ϵ_{xx} , ϵ_{yy} , ϵ_{zz} , ϵ_{yz} , ϵ_{xz} のうち、一成分に対し 0.1 % のひずみを与える 5 ケースの解析を行った。ひずみはユニットセルの基本ベクトル (Fig. 3.2 における **a**, **b**, **c**) を変更することにより与えた。得られた結果を六方晶における弾性定数マトリクスに当てはめることにより弾性定数のそれぞれの成分を求めた。 C_{11} 及び C_{12} には ϵ_{xx} と ϵ_{yy} の計算結果の平均値を、 C_{44} には ϵ_{yz} , ϵ_{xz} の計算結果の平均値を使用している。

次に、フォノン変形ポテンシャル係数を求めるため、ひずみを与えた結晶の Γ 点におけるフォノン振動数を計算した。それぞれの係数を独立に求めるため、応力状態として基底面での 2 軸等方応力 $\sigma_{xx} = \sigma_{yy}$, z 軸方向の 1 軸応力 σ_{zz} , 基底面内の純粋せん断応力 τ_{xy} の 3 条件を採用した。応力状態に対応した結晶は、弾性定数を用いて応力をひずみに変換し、ひず

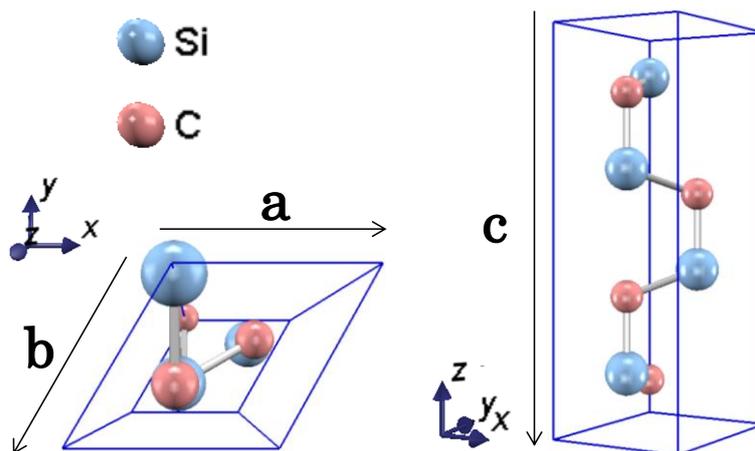


Fig. 3.2. Schematics of 4H-SiC unit cell. The lattice is deformed by changing lattice vectors; a , b , and c .

みに応じてユニットセルの基本ベクトルを変化させることにより作成した。エネルギー最小化計算により原子を最安定位置に移動させた後に、フォノン振動数の算出を行った。また、無ひずみ状態の結晶を用いて静電相互作用による LO-TO 分裂が TO モードに与える影響の検討も行った。LO-TO 分裂は、ボルン有効電荷と誘電テンソルを用いることにより計算可能である^{7,8}。それぞれの応力条件について 0 MPa, ± 100 MPa, ± 500 MPa, ± 1 GPa の 9 段階で計算を行った。得られた応力とラマンシフトの関係をもとに、最小二乗法を用いて線形回帰を行うことによりそれぞれのフォノン変形ポテンシャル係数を求めた。

3.3. 結果と考察

3.3.1. 解析結果

弾性定数について、第一原理計算の計算結果と実験値⁹の比較を Table 3.1 に示す。どの成分についても実験との差は 5 % 以内に収まっており、本計算が 4H-SiC の弾性定数をよく表現していることが確認できた。

Table 3.2 に無ひずみ状態でのフォノン振動数と実験^{4,10,11}の比較を示す。実験で報告されている振動数と計算結果は ± 5 cm^{-1} 以内で一致した。また、LO-TO 分裂が TO モードの振動数に影響を与えないことを確認した。そのため、以降の議論では LO-TO 分裂の影響は考慮していない。フォノン変形ポテンシャル係数の算出には $\langle 0001 \rangle$ 軸に平行な面を用いたラマン分光測定において TO モードとなる、 783.6 cm^{-1} (A_1 モード), 799.1 cm^{-1} (E_1 モード), 780.1 cm^{-1} (E_2 モード) の 3 つの振動の振動数変化を用いた。

Table 3.2. Elastic constants (GPa) obtained by calculation and experiments.

	C_{11}	C_{33}	C_{44}	C_{12}	C_{13}
This work	523.7	575.5	168.5	113.0	51.7
Experiment ⁹	507 ± 4	547 ± 4	159 ± 7	108 ± 5	52 ± 9 (value of 6H-SiC)

Table 3.1. Phonon frequencies (cm^{-1}) obtained by calculation and experiments.

A_1 (A and TO mode)		E_1 (A and TO mode)		E_2	
This work	Experiment	This work	Experiment	This work	Experiment
608.0	610 ¹	261.3	266 ¹	193.3	196 ¹
783.7	783 ⁷	771.9	N. A.	201.3	204 ¹
843.0	838 ¹	799.1	798 ⁷	780.1	776 ⁷
				788.0	N. A.

基底面内での2軸等方応力 $\sigma_{xx} = \sigma_{yy}$ および z 軸一軸応力 σ_{zz} について、応力と振動数変化の関係をそれぞれ Fig. 3.3, Fig. 3.4 に示す。これらの応力条件では応力とフォノン振動数の変化量は1 GPaを超えても比例関係であり、また2重に縮退している E_1 , E_2 モードの分裂も発生しなかった。これは、これらの応力状態では結晶は基底面内方向にはせん断変形をせず、六方対称性を保ったまま変形するためであると考えられる。また、2軸等方応力では E_1 , E_2 モードの振動数変化が応力への感度が高く、一方で z 軸一軸応力では A_1 モードの振動数変化が応力への感度が高いことがわかる。これは E_1 , E_2 モードが原子の xy 面内の振動に A_1 モードが z 軸方向への振動にそれぞれ対応しているためであると考えられる。

Fig. 3.5(a)に基底面の内純粋せん断応力 σ_{zz} と振動数変化の関係を、Fig. 3.5(b)にせん断応力の絶対値と振動数変化の絶対値の関係をそれぞれ示す。式(3.2), (3.3)より Fig. 3.5(b)における直線の傾きは $2c_{E1}$ 及び $2c_{E2}$ に一致する。フォノン振動数の応力依存性が変形の大きさによらず式(3.1)~(3.3)に従う場合、 $\Delta\omega_{A1}$ は0から変化せず、 $\Delta\omega_{E1}$ と $\Delta\omega_{E2}$ はプロットが直線に乗るはずである。しかしながら、解析結果ではせん断応力が500 MPa以上ある場合には、 $\Delta\omega$ は式(3.1)~(3.3)に従わなくなることが確認された。これは、大きなせん断変形により結晶の対称性が崩れたため、式(3.1)~(3.3)において仮定されている線形弾性理論に基づく微小変形が適用できなくなったためであると考えられる。大変形の影響が小さいせん断応力500 MPa以内の範囲では式(3.1)~(3.3)と計算結果の差は最大でも10%以内であるため、通常デバイスに付加される応力の範囲内においては、この差が測定結果に与える影響は小さいと考えられる。

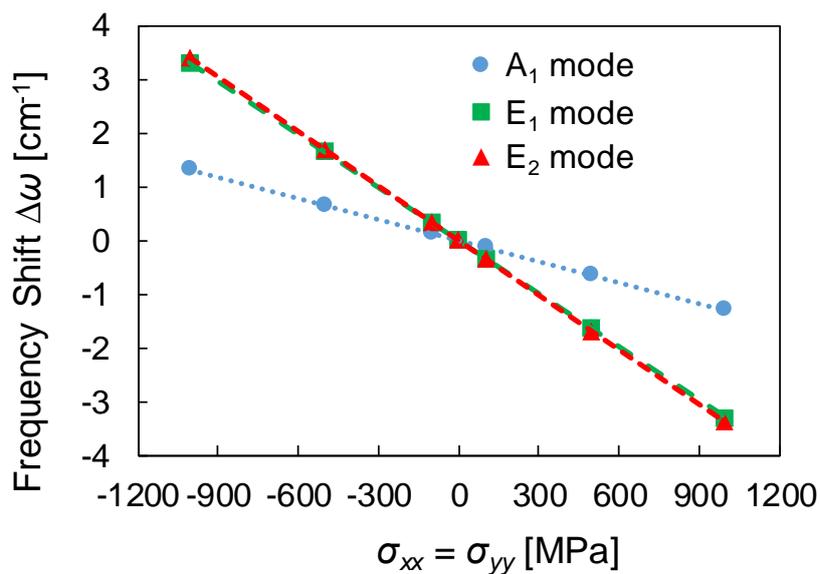


Fig. 3.3. Dependence of frequency shifts on biaxial isotropic stress on the basal plane. Each symbol shows the calculation results. Dashed straight lines indicate the result of fitting by the least squares method. The slopes of those straight lines represent $2a_{A_1}$, $2a_{E_1}$, and $2a_{E_2}$.

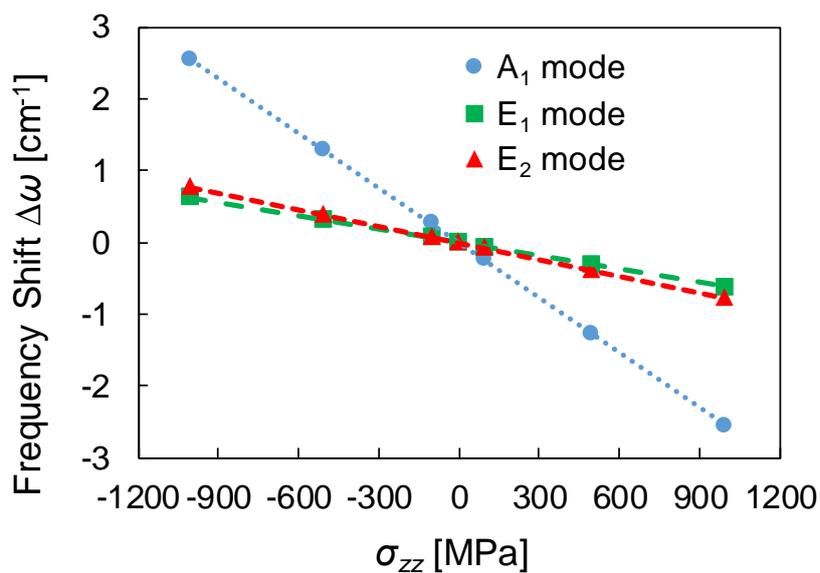


Fig. 3.4. Dependence of frequency shifts on uniaxial stress σ_{zz} . Each symbol shows the calculation result, and the dashed straight lines show the result of fitting by the least squares method. The slopes of those straight lines represent b_{A_1} , b_{E_1} , and b_{E_2} .

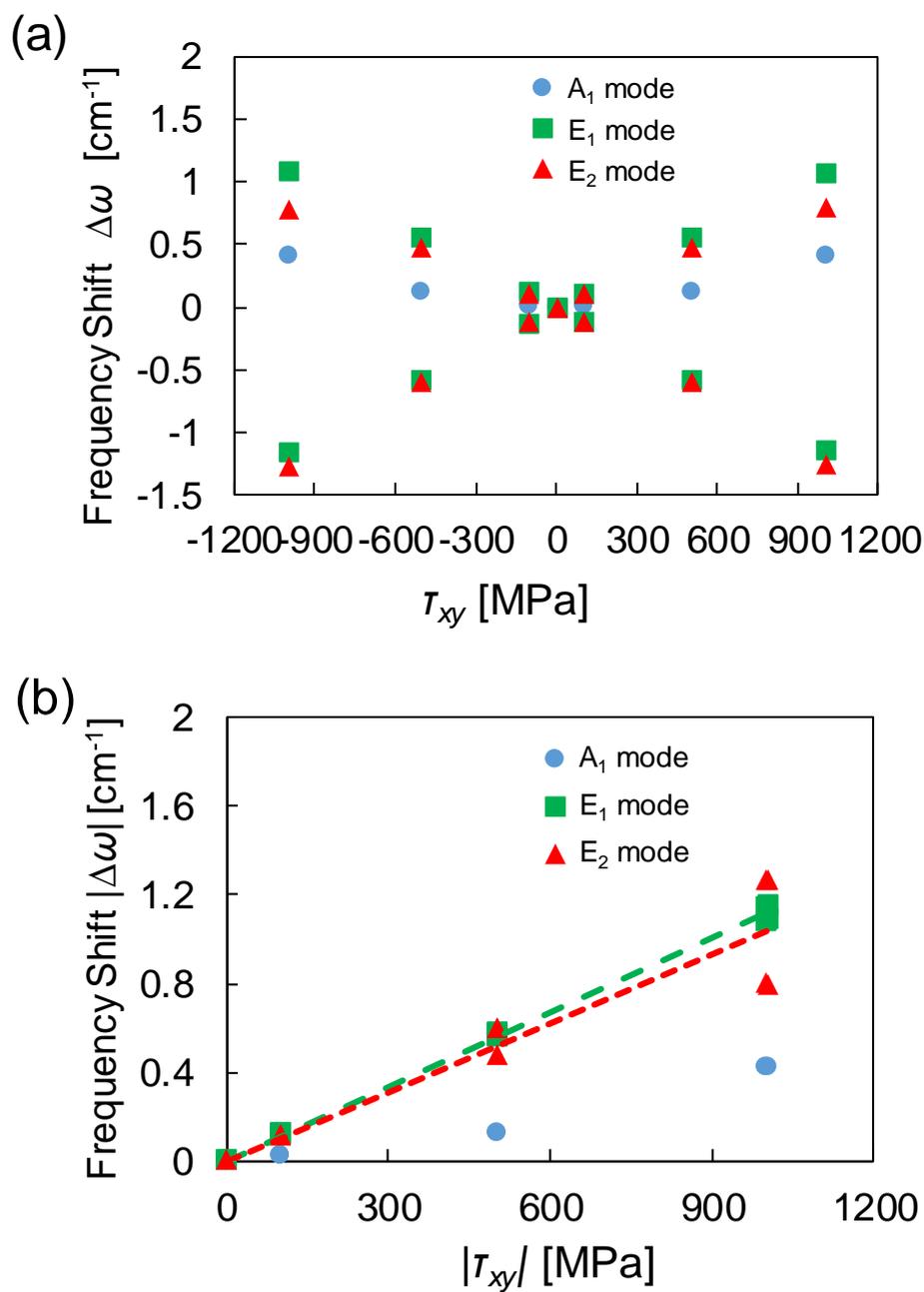


Fig. 3.5. (a) Dependence of the frequency shifts on the shear stress τ_{xy} and (b) relationship between absolute values of both. The dashed straight lines show the result of fitting by the least squares method. The slopes of those straight lines represent $2c_{E1}$ and $2c_{E2}$.

Table 3.3. Deformation potential constants calculated in this study ($\text{cm}^{-1}/\text{GPa}$).

i	a_i	b_i	c_i
A_1	-0.66 ± 0.01	-2.55 ± 0.01	
E_1	-1.65 ± 0.01	-0.62 ± 0.01	0.56 ± 0.01
E_2	-1.69 ± 0.01	-0.77 ± 0.01	0.52 ± 0.06

3.3.2. 妥当性の確認

以上の解析により得られたフォノン変形ポテンシャル係数の値を Table 3.3 に示す。これらの係数の妥当性を確認するため、実験との比較を行った。3C-SiC における静水圧 p (GPa) と TO フォノンの振動数変化 $\Delta\omega_{\text{TO}}$ (cm^{-1}) の関係は 22.5 GPa 以下の範囲では次の式(3.4)で与えられる¹²。

$$\Delta\omega_{\text{TO,3C-SiC}} = (3.88 \pm 0.08)p - (2.2 \pm 0.4) \times 10^{-2}p^2. \quad (3.4)$$

同様に、6H-SiC¹³ における、静水圧と TO フォノンの振動数変化の関係は 95 GPa 以下の範囲において次の式(3.5)で与えられている

$$\Delta\omega_{\text{TO,6H-SiC}} = 3.11p - 0.009p^2. \quad (3.5)$$

本解析で得られたフォノン変形ポテンシャル係数を用いると、静水圧と振動数変化の関係は以下の式(3.6)~(3.8)で与えられる。

$$\Delta\omega_{A_1} = (3.87 \pm 0.05)p, \quad (3.6)$$

$$\Delta\omega_{E_1} = (3.93 \pm 0.02)p, \quad (3.7)$$

$$\Delta\omega_{E_2} = (4.16 \pm 0.02)p. \quad (3.8)$$

圧力が 1 GPa 以下と小さい場合には 2 次の項は十分小さく無視できるため、1 次の項のみを用いた係数同士の比較が可能である。結晶多形が異なっているため対応する振動モードを直接比較することはできないが、式(3.6)~(3.8)で示されている本研究の結果と式(3.4), (3.5)で示される実験結果は 25 %以内の範囲で一致した。

4H-SiC での応力と振動変化の関係は 4 点曲げ試験を用いた一軸引張試験により測定されている。Sugiyama² らは 140 MPa 以下の範囲において E_2 モードの振動数変化、以下の関係を得ている。引張方向は y 軸方向である。但し、誤差範囲はグラフデータからの読み取りにより筆者が算出した。

$$\Delta\omega_{E_2} = -(1.96 \pm 0.13)\sigma \text{ on } (0001), \quad (3.9)$$

$$\Delta\omega_{E2} = -(2.08 \pm 0.18)\sigma \text{ on } (11\bar{2}0). \quad (3.10)$$

この測定における偏光方向は引張方向と同一であるため、一軸引張の条件下では式(3.3)の第三項の符号は負になる³。この条件では、本解析で得られた応力と振動数変化の関係は式(3.11)で表される。本研究と実験結果は最大 10 % 程度の範囲内で一致した。

$$\Delta\omega_{E2} = -(2.21 \pm 0.08)\sigma. \quad (3.11)$$

近年、Sugie と Uchida³により同様に 4 点曲げ試験による測定が行われた。この測定では x, y 軸方向について 250 MPa 以下の範囲、 z 軸方向について 450 MPa 以下の範囲において、一軸応力の仮定のもと、フォノン変形ポテンシャル係数の一部について、 $a_{A1} = -0.46$, $b_{A1} = -2.67$, $a_{E2} = -1.55$, $b_{E2} = -0.74$, $c_{E2} = -0.37$, $b_{E1} = -0.43$ ($\text{cm}^{-1}/\text{GPa}$) という値が報告された。実験において、 a_{E2} , b_{E2} , c_{E2} は、(0001)面を使用して測定されており、この結果は式(3.9)と一致している。我々の計算結果と実験結果は、 b_{A1} , a_{E2} , b_{E2} については 10 % 以内の範囲で一致していたが、一方で a_{A1} , b_{E1} , c_{E2} については本研究の計算結果はこれらの実験値よりも最大で約 45 % 程度大きかった。式(3.9), (3.10)に示される通り、実験には測定面の面方位により得られる値が 10 % 程度異なる可能性が示されている。また、Sugie らも指摘している通り、弾性定数についても報告間で 10 % 程度の不確かさが見られる^{9,14,15}。現在のフォノン変形ポテンシャル係数には不確かさが含まれているため、より正確な値の決定にはさらなる議論が必要である。

最後に、ラマン分光測定を用いた応力評価における熱ゆらぎの影響について検討する。フォノン振動数の温度依存性は以下の式(3.12), (3.13)で与えられる¹⁶。

$$\Delta\omega(T) = C[1 + 2n(T, \omega_0/2)] + D[1 + 3n(T, \omega_0/3) + 3n^2(T, \omega_0/3)], \quad (3.12)$$

$$n(T, \omega) = 1/[\exp(\hbar\omega/(k_B T)) - 1]. \quad (3.13)$$

4H-SiC では、 E_2 モードについて $C = -1.49$, $D = -0.73$, $\omega_0 = 782.8 \text{ cm}^{-1}$ であると報告されている³。これらの値を用いて式(3.12), (3.13)を室温から 600 °C の範囲で平均化すると、4H-SiC におけるフォノン振動数変化の温度依存性を見積もる式として、次の関係式(3.14)が得られる。

$$\Delta\omega_{E2} = -0.016 [\text{cm}^{-1}/^\circ\text{C}] \quad (3.14)$$

式(3.11)と式(3.14)を比較すると、温度 1 °C あたりのフォノン振動数変化が 1 軸応力の条件下では 10 MPa 程度に相当するということがわかる。そのため、ラマン分光測定を用いて数十 MPa 程度の精度で応力分布を評価する場合には、測定温度の管理や無応力における基準波数の決定精度が非常に重要となる。また、ラマンシフトを用いた応力解析では無応力状態との比較により振動数変化を決定するため、無応力状態の振動数の決定精度も重要となる。

3.4. 本章のまとめ

ラマン分光測定を用いて応力分布を評価する上で必要となる 4H-SiC のフォノン変形ポテンシャル係数の全成分を第一原理計算により算出した。xy 面上での 2 軸等方応力や z 軸方向の 1 軸応力では、変形ポテンシャルと計算結果は非常に良い一致を示した。一方で、xy 面でのせん断変形においては変形が大きくなるにつれて計算結果が変形ポテンシャルを用いた計算式に従わなくなることが確認された。これは大きなせん断変形により結晶の対称性が崩れ原子配置が変化したためであると考えられる。先行する実験結果との比較により、本論文で求めた変形ポテンシャルの妥当性を確認した。

本章の参考文献

- ¹ R.J. Briggs and A.K. Ramdas, Phys. Rev. B **13**, 5518 (1976).
- ² N. Sugiyama, M. Yamada, Y. Urakami, M. Kobayashi, T. Masuda, K. Nishikawa, F. Hirose, and S. Onda, MRS Proc. **1693**, mrss14 (2014).
- ³ R. Sugie and T. Uchida, J. Appl. Phys. **122**, 195703 (2017).
- ⁴ D.W. Feldman, J.H. Parker, W.J. Choyke, and L. Patrick, Phys. Rev. **173**, 787 (1968).
- ⁵ T. Ohno, T. Yamamoto, T. Kokubo, A. Azami, Y. Sakaguchi, T. Uda, T. Yamasaki, D. Fukata, and J. Koga, in *Proc. 2007 ACM/IEEE Conf. Supercomput. - SC '07* (ACM Press, New York, 2007).
- ⁶ S. IZUMI and S. SAKAI, JSME Int. J. Ser. A **47**, 54 (2004).
- ⁷ J.-M. Wagner and F. Bechstedt, Phys. Rev. B **66**, 115202 (2002).
- ⁸ NIMS, (n.d.).
- ⁹ K. Kamitani, M. Grimsditch, J.C. Nipko, C.K. Loong, M. Okada, and I. Kimura, J. Appl. Phys. **82**, 3152 (1997).
- ¹⁰ H. Harima, S. Nakashima, and T. Uemura, J. Appl. Phys. **78**, 1996 (1995).
- ¹¹ S. Nakashima and H. Harima, Phys. Status Solidi Appl. Res. **162**, 39 (1997).
- ¹² D. Olego, M. Cardona, and P. Vogl, Phys. Rev. B **25**, 3878 (1982).
- ¹³ J. Liu and Y.K. Vohra, Phys. Rev. Lett. **72**, 4105 (1994).
- ¹⁴ L. Pizzagalli, Acta Mater. **78**, 236 (2014).
- ¹⁵ H. Yao, L. Ouyang, and W.Y. Ching, J. Am. Ceram. Soc. **90**, 3194 (2007).
- ¹⁶ M. Balkanski, R.F. Wallis, and E. Haro, Phys. Rev. B **28**, 1928 (1983).

第4章 ラマン分光法と FEM 解析による 4H-SiC デバイスの応力解析手法の開発

4.1. 緒言

第3章では、フォノン変形ポテンシャルを求めることにより応力テンソルとラマンシフトの定量的な関係を明らかにした。しかしながら、第2章で述べたように、フォノン振動数はスカラー量であるため、ラマン分光による測定のみでは6つの成分で表される応力テンソルを評価することはできない。そこで第4章では、SiC デバイスで用いられている有限要素法解析 (FEM) とラマン分光法を組み合わせる応力解析手法¹⁻⁵を発展させ、4H-SiC パワーデバイスの応力分布を明らかにする応力解析手法の構築を行う。Fig. 4.1 に応力解析手法の概要を示す。この応力解析手法ではまず製造プロセスを再現する FEM 解析を行い、デバイスに生じる残留応力分布を解析的に求める。次に、得られた応力分布を第3章で求めたフォノン変形ポテンシャルを介してフォノン振動数変化の分布へと変換する。最後に解析により得られた振動数変化の分布を別途ラマン分光法によって実験的に測定された振動数変化

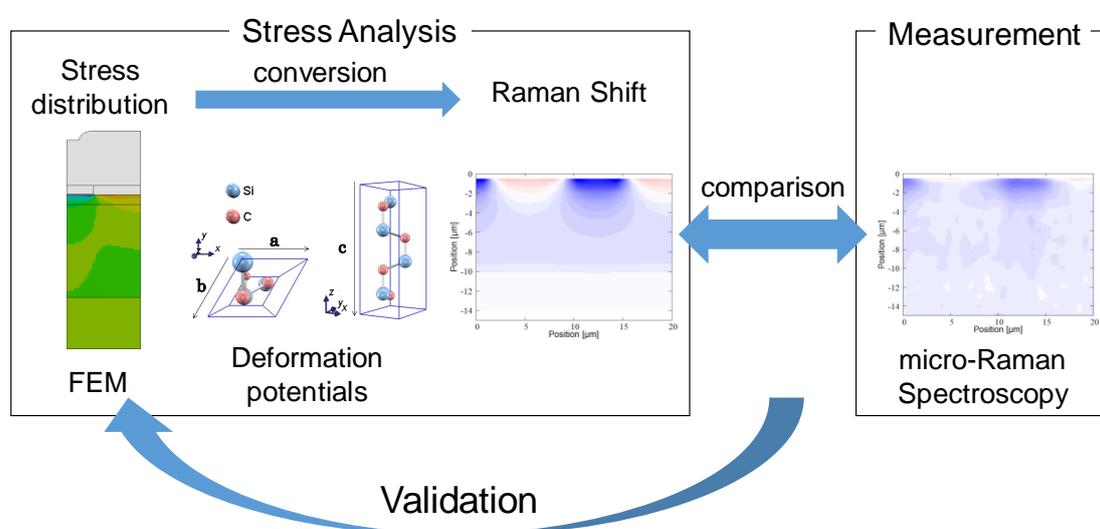


Fig. 4.1. The basic framework of the stress analysis via FEM and micro-Raman Spectroscopy.

の分布と比較することにより応力解析の妥当性の確認を行う。これにより、ラマン分光測定のみでは求めることのできない、成分毎に分解された応力分布を妥当性を確認した上で明らかにすることが可能となる。

本章では、pin ダイオードを対象に、以上の解析手順に基づいた応力解析を 4H-SiC パワーデバイスに適用する手法の構築を行う。また、SiC 上に作製される薄膜の材料定数および真性応力はまだ十分に測定結果が報告されていないため、pin ダイオードの製造過程で成膜される薄膜のヤング率、線膨張係数および真性応力の測定を行う。実際に作製した pin ダイオードに対しては顕微ラマン分光測定を行う。次に、pin ダイオードの製造プロセスを模擬した多段階熱応力 FEM 解析を行う。得られた応力分布をラマンシフトの分布へと変換し、応力解析の妥当性確認をラマンシフト分布の比較により行い、FEM 解析の結果を用いて応力分布とその発生についての議論を行う。最後に、本章で開発した応力解析手法の応用として、SiC-MOSFET へ適用した解析を行う。SiC-MOSFET の製造プロセスは公開されていないため、FEM 解析を行うためには製造プロセスの予測が必要となる。そのため、応力解析から得られるラマンシフトの分布をラマン分光測定結果と比較することにより、成膜温度と真性応力の合わせこみを行う。

4.2. 計算手法

4.2.1. デバイス構造と製造プロセス

本研究では産総研を中心に研究用に使用されている窓あき電極付き pin ダイオードを対象とした。pin ダイオードの構造を Fig. 4.2 に示す。SiC 基板は $[11\bar{2}0]$ 方向に 4° のオフ角がついている。順方向劣化現象における積層欠陥拡大のその場 EL 観察⁶⁻⁸のため、 $18\ \mu\text{m}$ の電極と $22\ \mu\text{m}$ の隙間が周期的に形成されている。

本素子の作成手順を Fig. 4.3 に示す。それぞれの手順の詳細及び真性応力の発生要因は次のとおりである。まず、SiC 基板上にエピタキシャル成長により $10\ \mu\text{m}$ の n 型のドリフト層を作成後、表面約 $1\ \mu\text{m}$ にアルミニウムを 500°C でイオン注入し p^+ 層を形成する。注入されたイオンは 1600°C でのアニールにより活性化されている。このプロセスでは不純物濃度が異なる SiC 層が作成されるため、不純物濃度の違いにより応力が生じる。本デバイスではドリフト層、 p^+ 層共に圧縮応力となる。次に、nondoped silicate glass (NSG) 膜と phosphosilicate glass (PSG) 膜からなる厚さ約 $0.9\ \mu\text{m}$ の SiO_2 膜を CVD により成膜後、 800°C で焼締を行う。このとき、 SiO_2 は焼締により緻密化するため真性応力が発生する。次に、電極のための穴をドライエッチングにより作成後、スパッタリングにより Ni コンタクト層を作成する。Ni 層はスパッタ後に 1000°C での焼締めを行うことにより厚さ約 $120\ \mu\text{m}$ のニッケルシリサイド層となる。この焼締めによりニッケルシリサイド層は緻密化、体積収縮を起こすため引

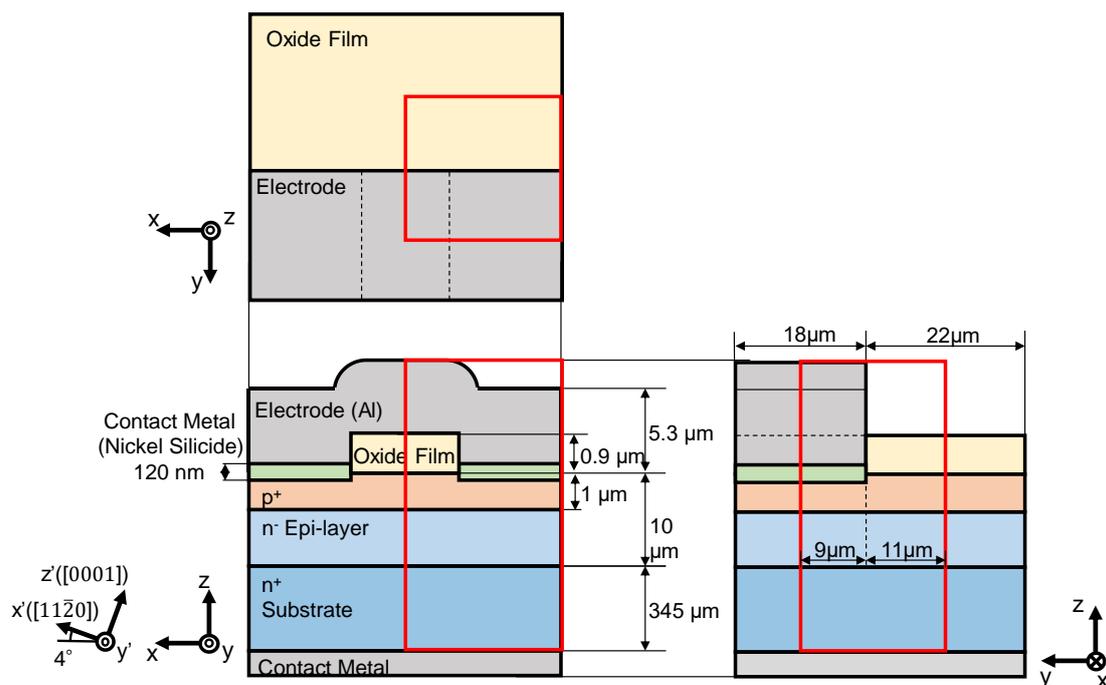


Fig. 4.2. Structure of the 4H-SiC pin diode used in this study. The electrode has the line-and-space pattern for in situ observation of dislocation movement during forward current conduction. The 1/4 FEM analysis model corresponds to the region surrounded by red lines in this figure.

張応力が発生する。最後にスパッタリングにより厚さ約 $5.3 \mu\text{m}$ の Al 電極を 250°C で作成する。Al 積層時にも真性応力が生じる可能性があるが、シリコンデバイスに対する先行研究において、約 150°C 以上での積層ではアルミニウムの塑性変形により真性応力が残留応力には影響しないことが示されているため^{9,10}、本研究では Al 積層時の真性応力は残留応力に影響を与えないものとした。

4.2.2. 材料定数と真性応力の測定

残留応力を高精度に求めるためには、デバイス製造過程で成膜される各薄膜の材料定数および真性応力を高精度に把握することが重要となる。SiC 上に形成された薄膜(SiO_2 膜及びニッケルシリサイド膜)の材料特性は従来使用されている Si 上に作成された薄膜のそれとは異なる可能性があるため、ヤング率及び線膨張係数の測定を行った。ヤング率の測定はナノインデンテーション¹¹ により行った。ナノインデンテーションでは、薄膜へ三角錐形の圧子を押し付けることにより、複合弾性率 E^* を測定する。この複合弾性率は薄膜と圧子の弾性率 E_f , E_i それぞれとは以下の関係がある。

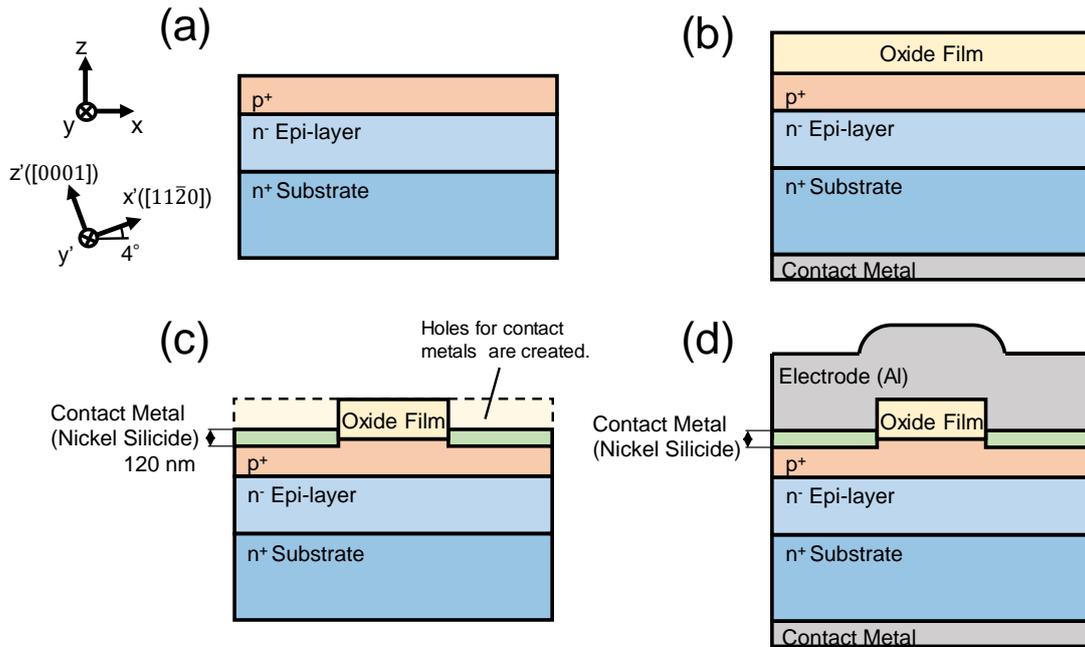


Fig. 4.3. Schematic illustrations of the creation process of the pin diode. Firstly, (a) an n-type drift layer is formed by epitaxial growth on the SiC substrate. A p^+ layer is also formed by ion implantation of aluminum into the surface. Secondly, (b) a SiO_2 film is formed by CVD and sintered at 800°C . Then, (c) a Ni contact layer is formed by sputtering after making holes for contact are made by dry etching. The Ni layer becomes a nickel silicide layer with a thickness of about $120\ \mu\text{m}$ by sintering at 1000°C . Finally, (d) an Al electrode are formed by sputtering at 250°C .

$$\frac{1}{E^*} = \frac{(1 - \nu_f^2)}{E_f} + \frac{(1 - \nu_i^2)}{E_i} \quad (4.1)$$

ただし, ν_f , ν_i はそれぞれ薄膜, 圧子のポアソン比である. 本測定では圧子にダイヤモンド ($\nu_i = 0.07$, $E_i = 1141\ \text{GPa}$) を用いている. 式(4.1)を用いたヤング率の測定のためには, 材料のポアソン比を仮定する必要がある. ただし, ポアソン比は式(4.1)では自乗されるため, 換算結果として得られるヤング率へ与える影響は小さいと考えられる. それぞれの薄膜に対して仮定したポアソン比の値は測定結果と共に 4.3.1 に示す. また, 薄膜の線膨張係数は基板の反りの温度依存性を測定することにより推定した. 薄膜をつけることにより基板の曲率半径が R_0 から R_1 へと変化した場合を考える. このとき, 薄膜の成膜では 2 次元等方の平面応力状態を仮定することができるため, 基板の曲率半径と薄膜の応力 σ_f の間には Stoney の式¹² と呼ばれる以下の関係が与えられる.

$$\sigma_f = \frac{E_s t_s^2}{6(1-\nu_s)t_f} \left(\frac{1}{R_1} - \frac{1}{R_0} \right). \quad (4.2)$$

ここで、 E_s 、 t_s はそれぞれ基板のヤング率とポアソン比、 t_s と t_f はそれぞれ基板と薄膜の膜厚である。また、基板と薄膜の線膨張係数 α_s 、 α_f の間には、

$$\alpha_f = \alpha_s - \frac{\Delta\sigma(1-\nu_f)}{\Delta T E_f}, \quad (4.3)$$

の関係がある。薄膜の線膨張係数は、式(4.3)を用いて σ_f の温度依存性の傾きより決定した。測定には、デバイスと同じ製造プロセスで SiC 基板上に平坦膜を作成したサンプルを使用した。薄膜の作成面はどちらも Si 面上である。また、エピタキシャル成長膜、SiO₂膜、ニッケルシリサイド膜で生じる真性応力を測定した。真性応力は、成膜温度における内部応力として、反り測定を用いて求めた測定した室温における内部応力から熱応力の寄与分を除くことにより求めた。

4.2.3. ラマン分光測定

4.2.1 で述べた製造プロセスに基づいて作成された pin ダイオードを用いて顕微ラマン分光測定を行った。測定領域は Fig. 4.4 に示す電極直下部の 20 μm \times 15 μm の領域で、測定断面は Fig. 4.5 における A 面に相当する電極と隙間の境界面である。測定点は水平方向には 0.8 μm 間隔、垂直方向には 1.0 μm 間隔の合計 390 点である。但し、SiC と電極の界面は測定できないため、界面から 0.5 μm の点において測定を行っている。測定断面は切断、機械研磨の後イオンミリング加工により作成されている。測定装置には Horiba Jobin Yvon 製の Ramanor U-1000 を、光源として波長 457.9 nm の Ar⁺レーザーを使用した。測定には NA = 0.55、スポット径約 0.7 μm のレンズを使用しており、測定の分解能は $\pm 0.02 \text{ cm}^{-1}$ 、SiC への侵入深さは数 μm 程度であると考えられる。偏光測定配置は Z // $\langle 0001 \rangle$ 、X // $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ とすると Y(X,X+Z)Y である。測定では 799 cm^{-1} 付近の E₁(TO)、777 cm^{-1} 付近の E₂(TO)、783 cm^{-1} 付近の A₁(TO) の 3 つのフォノンによるラマン線が観測された。

4.2.4. FEM 解析

① FEM 解析モデル

本研究で使用した解析モデルを Fig. 4.5 に示す。応力解析には汎用有限要素法解析ソフト ANSYS 17.0 を使用した。有限要素モデルは六面体 2 次要素で構成されており、要素数は 55,878 要素、節点数は 240,498 節点である。pin ダイオードは対称な形状であるため、解析モデルとして 1/4 モデルを採用した。SiC 基板は結晶方位が Fig. 4.2 での x'y'z'座標系に相当するように設定した。応力による構造全体の拡大、収縮に対応するため SiC 基板は高さ方向

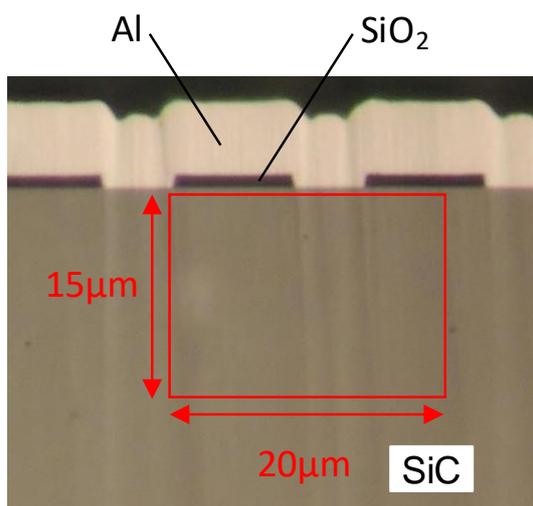


Fig. 4.4. Measurement area of micro-Raman spectroscopy. A $15 \times 20 \mu\text{m}^2$ region just under the Al electrode was measured at intervals of $0.8 \mu\text{m}$ in the horizontal direction and $1.0 \mu\text{m}$ in the vertical direction.

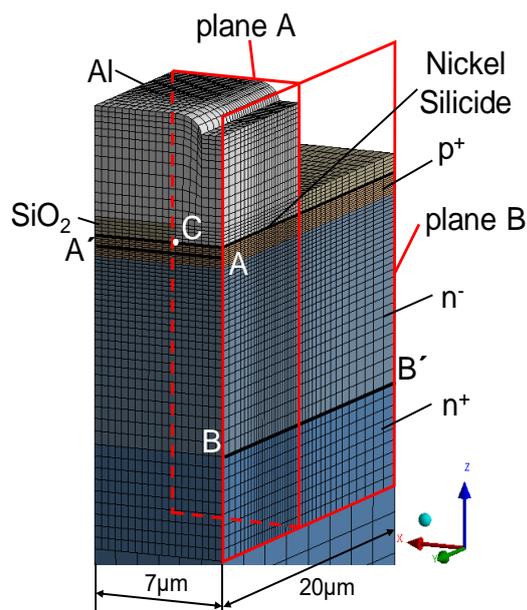


Fig. 4.5. 1/4 FEM analysis model. Each thin film was sequentially formed in accordance with the manufacturing process.

にウェハと同じ $345 \mu\text{m}$ の厚さを与えている。裏面に作成されるコンタクトは、表面側の応力分布に与える影響は非常に軽微であると考えられるため、本解析では考慮していない。

対称境界条件を保った状態で応力によりチップ全体が膨張、収縮する現象を再現するため、拘束条件として側面は一面を面に垂直な方向の変位を固定し、反対側の面には平行な平面を保ったまま面に垂直な方向に移動ができるように平面カップリング拘束を設定した。平面拘束は対称境界条件に相当するため、側面4面が平面拘束されている本モデルは、周期的な構造を持つデバイスの1周期分の1/4モデルに対応している。SiC基板が 4° 傾いているため、1/4モデルでの対称境界条件はチップの構造に厳密には対応していないが、より粗いメッシュで作成したフルモデルとの比較により1/4モデルとフルモデルの応力分布はほぼ一致することを確認している。

② 多段階熱応力解析

①で示したFEMモデルを用いて、デバイスの製造工程を解析上で擬似的に再現する多段階熱応力解析を行った。この解析は、デバイスの製造プロセスに従い各プロセス温度において薄膜を順番に成膜してゆく過程を再現した解析である。SiC上へSiO₂膜を成膜する場合(Fig.4.3(b))を例に、多段階熱応力解析の具体的な手順について説明する。

FEM解析では、実際に要素を生成・削除することなく、要素の剛性を変化させることで薄膜の生成、削除を模擬する機能が存在する。本研究で使用したANSYSでは要素パース・デス機能と呼ばれる。これは、生成されていない要素の剛性を非常に小さくすることにより

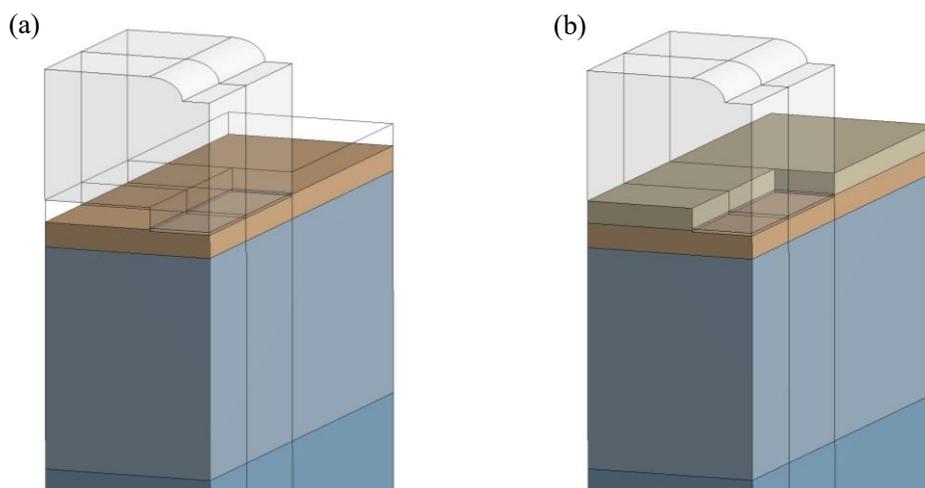


Fig. 4.6. Schematic illustrations of analysis model (a) before and (b) after formation of SiO₂ film. The semitransparent area indicates the area where the element is not generated, or the rigidity is set very small.

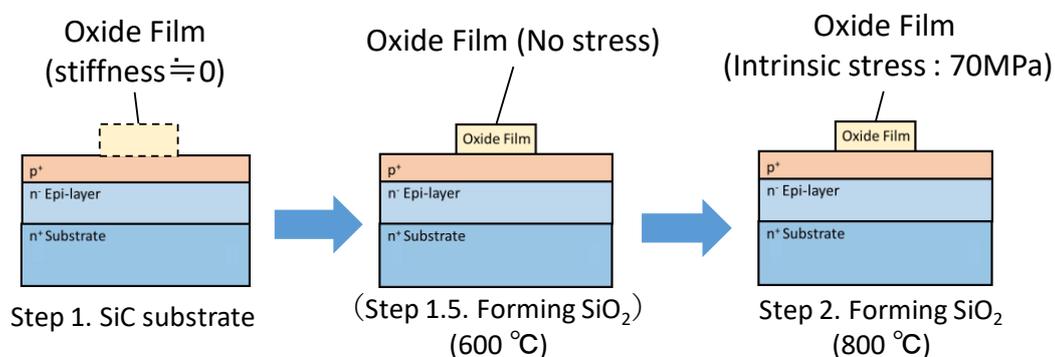


Fig. 4.7. Schematic illustrations of the analysis steps of SiO₂ film formation. In order to set the SiO₂ film to have an intrinsic stress of 70 MPa at 800 °C, the SiO₂ film is generated at 600 °C and the intrinsic stress is reproduced by the thermal stress.

擬似的に存在しないものとして扱う手法である。Fig. 4.6 に SiO₂ 成膜前後における FEM モデルのイメージを示す。モデルにおいて、半透明で示されている領域は要素生成前、色付きの領域は要素生成後にそれぞれ対応している。

4.2.1 で述べたように、SiO₂ 膜は 800 °C で成膜される。また、4.3.1 で示すように、測定により SiO₂ 膜には 800 °C において約 70 MPa の真性応力が存在することがわかっている。このため、800 °C において約 70 MPa の真性応力を持つ SiO₂ 膜を成膜することが解析設定上の目標となる。Fig. 4.7 に SiO₂ 膜を FEM 上で成膜する場合の解析ステップのイメージを示す。

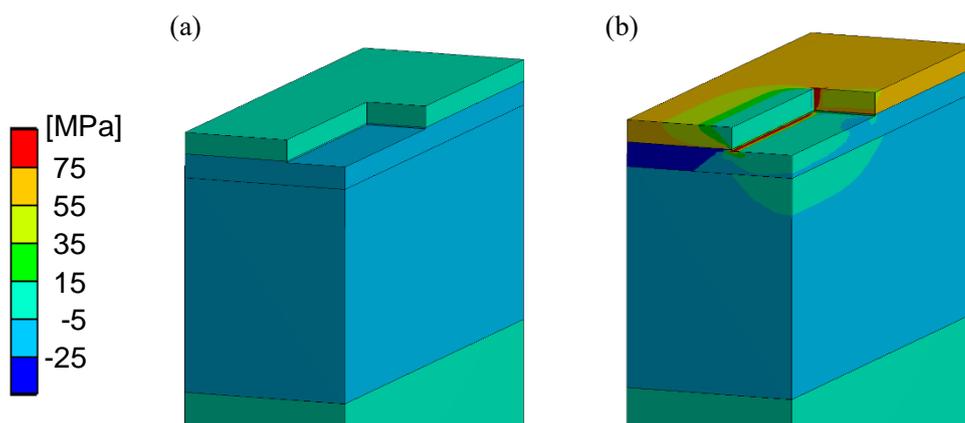


Fig. 4.8. Distribution of σ_{xx} at (a) analysis step 1.5 (600 °C) and (b) analysis step 2 (800 °C).

本研究では解析途中で成膜される薄膜の真性応力を，熱応力によって模擬している．解析 Step.1.5 において SiO₂ 膜を 600 °C で成膜し，解析 Step 2 で 800 °C に昇温することにより，200 °C 分の熱応力を SiO₂ にかかる真性応力として扱うことが可能となる．Fig. 4.8 に Fig. 4.7 における Step 1.5. と Step 2. の状態での垂直応力分布を示す．Step 1.5 の 600 °C の段階では要素生成直後であるため，SiO₂ 膜には応力が生じていない．一方で，Step 2 に相当する 800 °C への昇温後には SiO₂ 膜に約 70 MPa の引張応力が生じていることがわかる．コンタクト層作成のための穴が空いているため，穴の周囲で応力が変化しているが，平坦膜を成膜した場合には，一様に引張応力が生じる．

以上の手法を用いる事により，800 °C において約 70 MPa の真性応力をもつ SiO₂ 膜が成膜されるという工程を FEM 解析上で再現することが可能となる．ニッケルシリサイド膜，Al 電極についても同様の手法により成膜を行った．

4.2.5. 応力分布のラマン線シフト分布への変換

ラマン分光測定の結果との比較のため，FEM 解析により得られた応力分布をフォノン振動数変化量の分布へと変換した．応力とフォノン振動数変化の関係は式(3.1)-(3.3)に第 3 章で求めた変形ポテンシャル係数を代入することで与えられる．第 3 章でも述べたように，せん断応力が加わると結晶の対称性が崩れるため，2 重に縮退していた E₁, E₂ モードは振動数の異なる 2 つの振動にそれぞれ分裂する．ラマン分光測定で測定されるピーク振動数の変化はこれらの平均値として与えられるため，その関係を見積もる必要がある．まず，E₁, E₂ モードでの原子の振動方向について考える．C_{6v}⁴空間群に属する結晶の E₁, E₂ モードについて，式(3.2), (3.3)で示した応力による振動数の変化は以下の固有方程式の固有値 ΔE として与えられている¹³．

$$\begin{vmatrix} a_{E1}(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) + b_{E1}\sigma_{zz} + c_{E1}(\sigma_{xx} - \sigma_{yy}) - \Delta E & 2c_{E1}\tau_{xy} \\ 2c_{E1}\tau_{xy} & a_{E1}(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) + b_{E1}\sigma_{zz} - c_{E1}(\sigma_{xx} - \sigma_{yy}) - \Delta E \end{vmatrix} = 0, \quad (4.4)$$

この固有方程式の固有ベクトルは、固有値に対応した振動方向を示していると考えられることができる。この固有ベクトルを \mathbf{v} とおくと、以下の式変形により \mathbf{v} は行列 \mathbf{A} の固有ベクトルと一致することがわかる。

$$\begin{pmatrix} a_{E1}(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) + b_{E1}\sigma_{zz} + c_{E1}(\sigma_{xx} - \sigma_{yy}) & 2c_{E1}\tau_{xy} \\ 2c_{E1}\tau_{xy} & a_{E1}(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) + b_{E1}\sigma_{zz} - c_{E1}(\sigma_{xx} - \sigma_{yy}) \end{pmatrix} \mathbf{v} = \Delta E \mathbf{v}, \quad (4.5)$$

$$\begin{pmatrix} a_{E1}(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) + b_{E1}\sigma_{zz} & 0 \\ 0 & a_{E1}(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) + b_{E1}\sigma_{zz} \end{pmatrix} \mathbf{v} + c_{E1} \mathbf{A} \mathbf{v} = (a_{E1}(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) + b_{E1}\sigma_{zz} + \Delta E') \mathbf{v}, \quad (4.6)$$

但し、

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} - \sigma_{yy} & 2\tau_{xy} \\ 2\tau_{xy} & -(\sigma_{xx} - \sigma_{yy}) \end{pmatrix}. \quad (4.7)$$

一方、 xy 平面内における主応力は以下の式の固有ベクトル、固有値で表される。

$$\begin{vmatrix} \sigma_{xx} - \lambda & \tau_{xy} \\ \tau_{xy} & \sigma_{yy} - \lambda \end{vmatrix} = 0. \quad (4.8)$$

同様の議論により、固有ベクトルを \mathbf{v} とおくと式変形により次の式が得られる。

$$\begin{pmatrix} \frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy}}{2} & 0 \\ 0 & \frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy}}{2} \end{pmatrix} \mathbf{v} + \frac{1}{2} \mathbf{A} \mathbf{v} = \left(\frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy}}{2} + \lambda' \right) \mathbf{v}. \quad (4.9)$$

よって、この行列の固有ベクトルも行列 \mathbf{A} の固有ベクトルと一致する。以上の議論により、 E_1 , E_2 モードの振動方向は基底面内における主応力の方向と一致することがわかる。式(4.4)の固有値となる 2 つの振動数をそれぞれ低い方から ω_{E_Low} , ω_{E_High} とそれぞれ表すと、 ω_{Low} は基底面内における第一主応力方向の振動の振動数に、 ω_{E_High} は基底面内における第二主応力方向の振動の振動数に対応している。この関係は第 3 章で用いた第一原理計算の結果からも確認できた。

ラマン分光測定において偏光方向が主応力方向と一致しない場合、測定される振動数は ω_{E_Low} , ω_{E_High} を重み付け平均した値となる。SiC において、 c 軸となす角が φ である方向から TO モードを測定する場合、測定される振動数 ω_T は、Fig. 4.9(a)に示す位置関係にある $A_1(\text{TO})$ モードの振動数 ω_{A1T} と $E(\text{TO})$ モードの振動 ω_{ET} 数の平均値として以下の式で与えられる^{14,15}。

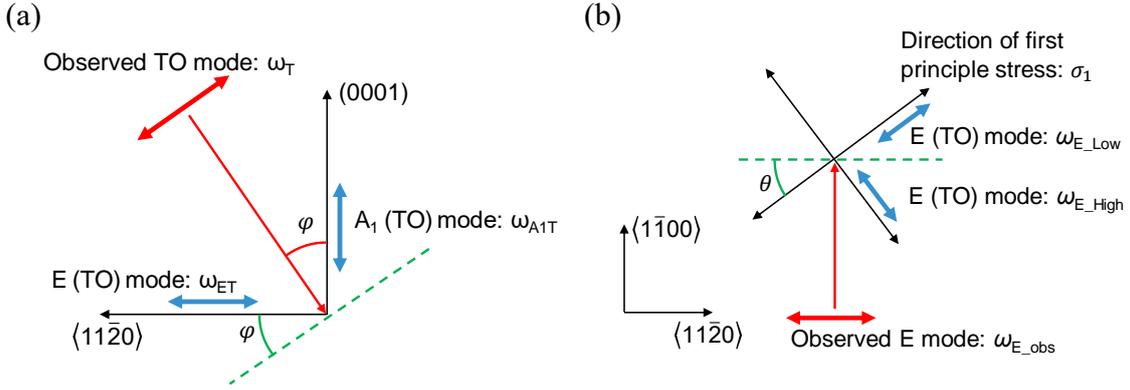


Fig. 4.9. Relationship between measured vibration mode and crystal orientation when measuring TO mode. (a) Relationship between the angle between the c-axis and the measurement direction shown in a previous study. (b) Relationship between principal stress direction in the (0001) plane and vibration modes.

$$\omega_T^2 = \omega_{A1T}^2 \sin^2 \varphi + \omega_{ET}^2 \cos^2 \varphi. \quad (4.10)$$

この関係と同様に、測定される E₁、E₂ モードの振動数も振動方向と伝播方向の関係から見積もることを考える。本研究におけるレーザーの入射方向は Y // $\langle 1\bar{1}00 \rangle$ であるため、X 軸と第一主応力のなす角を θ とすると、その位置関係は Fig. 4.9(b) で表される。この時、式(4.10)と同様に考えることにより、ラマン分光特定で測定される振動数 ω_{E_obs} は

$$\omega_{E_obs}^2 = \omega_{E_High}^2 \sin^2 \theta + \omega_{E_Low}^2 \cos^2 \theta \quad (4.11)$$

で与えられる。ただし、

$$\tan 2\theta = \frac{2\tau_{x'y'}}{\sigma_{x'x'} - \sigma_{y'y'}}. \quad (4.12)$$

無応力状態での振動数を ω_{E_0} とおくと、 $\Delta\omega/\omega_{E_0} \ll 1$ であるから、測定されるフォノン振動数の変化量 $\Delta\omega_{E_obs}$ は、

$$\Delta\omega_{E_obs} \simeq \Delta\omega_{E_High} \sin^2 \theta + \Delta\omega_{E_Low} \cos^2 \theta, \quad (4.13)$$

と見積もることができる。

応力分布のフォノン振動数変化量への変換には、測定面から侵入深さ 5 μm の領域を用いた。各測定点において、応力はスポット経と侵入深さ方向に平均化されている。平均化した応力を式(3.1)~(3.3)、(4.12)、(4.13)に基づいてフォノン振動数変化へと変換した。

4.3. 結果と考察

4.3.1. 材料特性と真性応力

測定により得られた、SiC 上に作成された PSG 膜のヤング率は $E = 87.5$ GPa, 線膨張係数は $\alpha = 1.57 \times 10^{-6}$ [1/K] であった。ただし、ポアソン比は $\nu = 0.2$ とした。Si 上に作成された PSG 膜では $E = 50$ GPa, $\alpha = 0.87 \times 10^{-6}$ [1/K] であり^{16,17}, SiC 上の PSG 膜のヤング率, 線膨張係数は共に Si 上に作成されたものに比べわずかに大きいことがわかった。同様に SiC 上に成膜されたニッケルシリサイド膜のヤング率, 線膨張係数はそれぞれ $E = 203$ GPa, $\alpha = 15.5 \times 10^{-6}$ [1/K] であった。ただし、ポアソン比は $\nu = 0.3$ とした。ヤング率は Si 上で作成されたもの^{18,19} に比べ大きく, 一方線膨張係数は小さい値であった。

SiC の材料定数には文献値を用いて弾性定数²⁰ を $C_{11} = 507$ GPa, $C_{33} = 547$ GPa, $C_{44} = 159$ GPa, $C_{12} = 108$ GPa, $C_{13} = 52$ GPa, 線膨張係数²¹ を室温から 1000 °C の間の平均値を用いて $\alpha_{11} = 4.47 \times 10^{-6}$ [1/K], $\alpha_{33} = 4.06 \times 10^{-6}$ [1/K] とした。Al の材料特性については文献値^{22,23} を用いて $E = 70$ GPa, $\nu = 0.35$, $\alpha_{Al} = 25.8 \times 10^{-6}$ [1/K] (室温から 250 °C の平均値) とした。Al の降伏応力はシリコンデバイスで使用されている値を元に $\sigma_Y = 185$ MPa とした²²。

また, 測定により得られたエピタキシャル成長膜, SiO₂ 膜, ニッケルシリサイド層の真性応力はそれぞれ -10 MPa, 800 °C で 70 MPa, 室温で 1150 MPa であった。塑性変形により測定を行えなかった p⁺ 層の真性応力は -20 MPa とした。

4.3.2. FEM 解析結果とラマン分光測定結果の比較

ラマン測定において最も強度が強かった E₂ モードについて, ラマン分光測定結果と FEM 解析により得られた応力分布から変換した振動数変化をそれぞれ Fig. 4.10(a), (b) に示す。

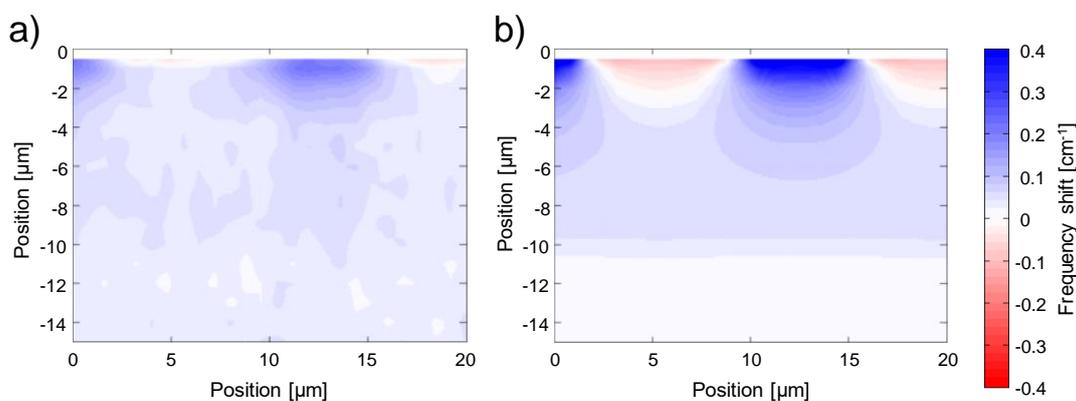


Fig. 4.10. Frequency shift distribution of E₂ mode obtained by (a) Raman spectroscopy measurement and (b) stress analysis.

第3章で示した通り、E₂モードは σ_{xx} 及び σ_{yy} に対する感度が高い。また、ラマン分光測定の結果よりNiコンタクト下部ではラマンシフト変化の符号が正であることから圧縮応力が支配的である一方で、SiO₂下部では符号が負であることから引張応力が支配的であると推測される。

Fig4.10(a), (b)に示すように応力解析の結果と測定結果は似た分布であった。しかしながら、SiCと電極の界面近傍では解析結果は実験結果に比べやや大きい振動数変化を示した。この原因として、シリサイド化が均一に生じていないために界面構造の不均質性により応力集中が緩和されていること、ラマン分光法測定に必要な断面作成の影響やそのための加工による応力緩和などが考えられる。

4.3.3. 応力分布

① 垂直応力

Fig. 4.11 にラマン分光の測定面である Fig. 4.5 の A 面における垂直応力の分布を、Fig 4.12 に Fig. 4.5 の B 面における垂直応力の分布をそれぞれ示す。Fig. 4.11 より、電極界面から 0.5 μm の深さでは、 σ_{xx} についてニッケルコンタクト下部に最大で 100 MPa 程度の圧縮応力が生じていることがわかる。この応力は Al と SiC 間の熱応力によるものと考えられる。また、SiO₂ 下部に最大で 60 MPa 程度の引張応力が生じていた。この分布は SiO₂ と SiC 間の熱応力および Ni コンタクト層のシリサイド化により生じていると考えられる。これらの傾向は x-y 平面内における他の成分においても同様であった。この応力分布は、Fig. 4.10 に

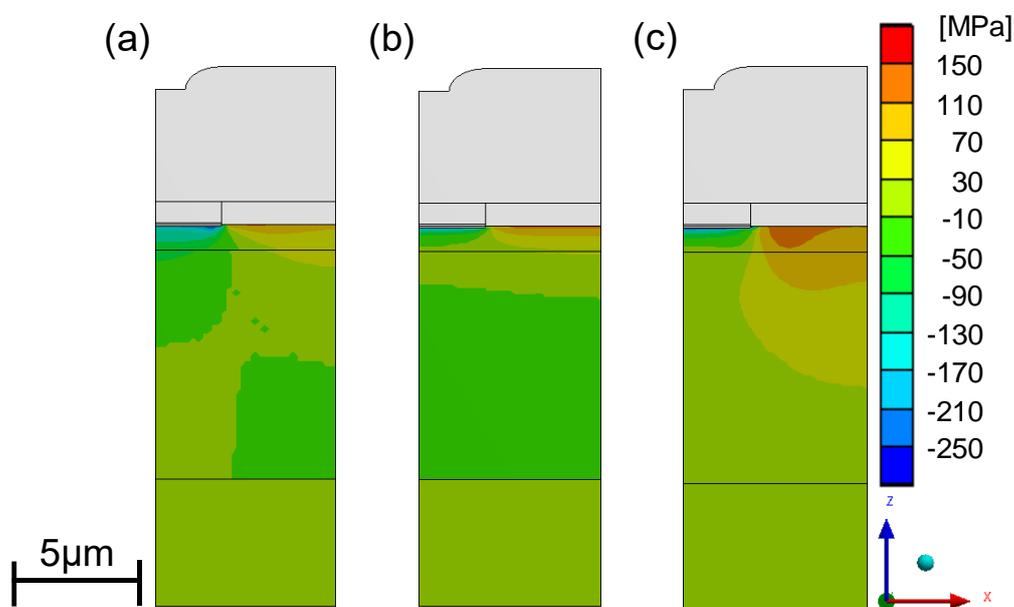


Fig. 4.11. Distributions of (a) σ_{xx} , (b) σ_{yy} , and (c) σ_{zz} on plane A. This plane coincides with the edge of the Al electrode.

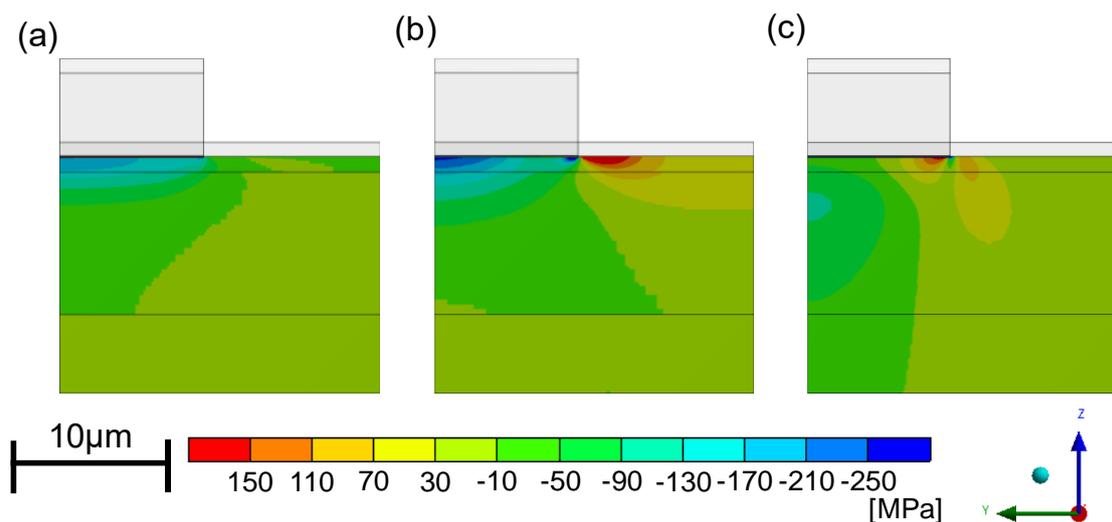


Fig. 4.12. Distributions of (a) σ_{xx} , (b) σ_{yy} , and (c) σ_{zz} on plane B.

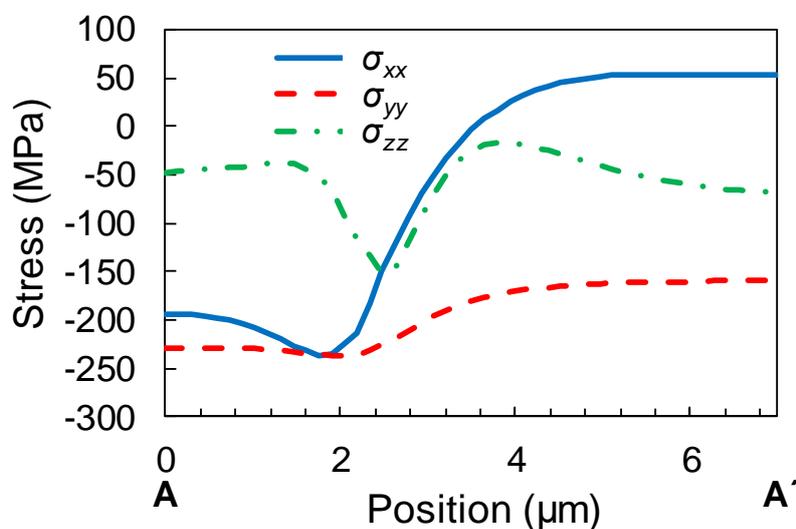


Fig. 4.13. (a) σ_{xx} , (b) σ_{yy} , and (c) σ_{zz} along the line AA'.

示したようにニッケルコンタクト下部では圧縮応力が支配的であるため振動数変化の符号が正であるのに対し、 SiO_2 下部では引張応力が支配的であるため振動数変化の符号が負であることに対応している。

AA'直線部における垂直応力分布を Fig. 4.13 に示す。Fig. 4.11 で示した A 面は楕歯構造になっている Al 電極の端であったのに対し、AA'直線部は Al 電極の中央部直下の深さ $0.5 \mu\text{m}$ の位置である。Ni 下部では σ_{xx} , σ_{yy} 共に約 -240 MPa , SiO_2 下部では σ_{xx} に約 60 MPa の応力が生じていた。加えて、 σ_{zz} については平均で 50 MPa 程度の圧縮応力が生じており、Fig. 4.5

での点 c に当たる Al と SiO₂ の境界直下である 2.5 μm 付近では応力が急峻に変化していた。これは、Al の熱収縮および Al と SiO₂ 間の熱応力によるものと考えられる。

② 基底面内のせん断応力

面 A と SiC/電極界面における基底面内のせん断応力 τ_{xy} の分布をそれぞれ Fig. 4.14(a), (b) に示す。ニッケルコンタクトの角部を中心にせん断応力が生じていることがわかる。これはニッケルの緻密化やシリサイド化によって生じた強い圧縮応力によるものであると考えられる。FEM 解析では角部に応力集中が生じるため、実際の応力分布に比べ強いせん断応力が生じている。しかしながら、Fig. 4.11 と比較するとその分布は SiC/電極界面から 1 μm 以内と局所的であり、またその大きさも垂直応力に比べると小さい。そのため、Fig. 4.10 で示したラマンシフトの分布へ与える影響は非常に小さい。

本解析で対象としたデバイスは SiC 基板上に 2 次元的に電極を積み重ねていくプレーナ型デバイスであるため、電極界面の近傍を除くと応力集中などの影響は小さい。しかしながら、今後発展が見込まれる基板に凹凸構造や穴を整形して電極を埋め込むトレンチ型デバイスでは、生じる残留応力も大きくなり、またトレンチ構造の角部に応力集中が生じる^{3,24}。そのため、トレンチ型デバイスではせん断成分が応力分布やラマンシフト分布に与える影響が大きくなる可能性が考えられる。

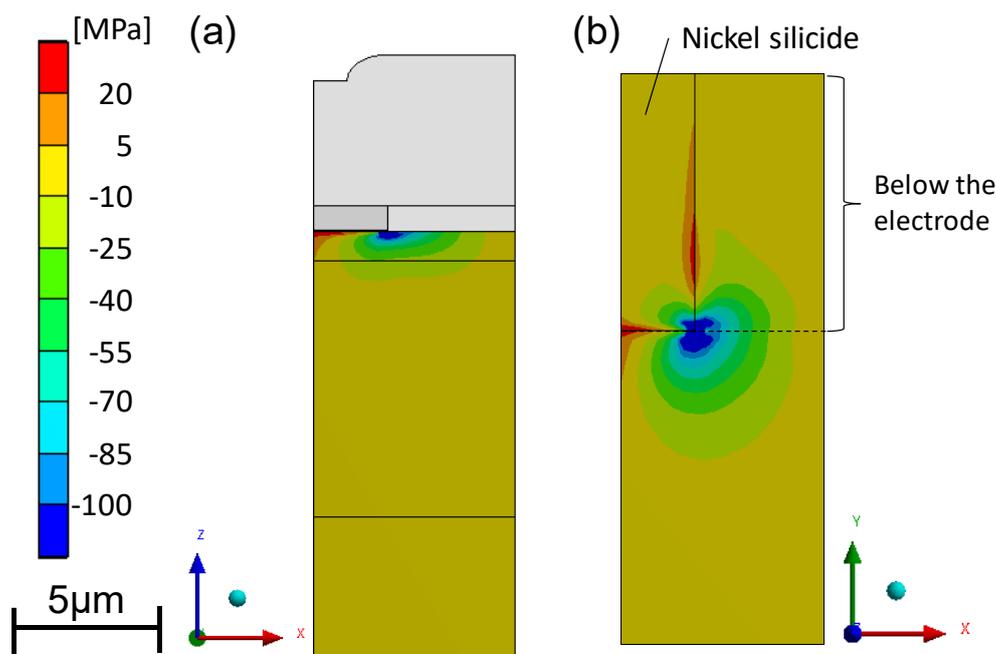


Fig. 4.14. Distributions of shear stress τ_{xy} in the basal plane at (a) plane A and (b) SiC/electrode interface.

③ 分解せん断応力

順方向劣化現象の原因となる積層欠陥拡大に応力が与える影響を明らかにするためには、デバイス内部の分解せん断応力の分布を明らかにする必要がある。部分転位のバーガースベクトルとしては、 $\pm 1/3[10\bar{1}0]$, $\pm 1/3[\bar{1}100]$, $\pm 1/3[0\bar{1}10]$ が考えられる²⁵ため、考慮すべき分解せん断応力もそれぞれのバーガースベクトルの方向に沿った3成分となる。第3章で述べたように、順方向劣化現象において素子の信頼性へ与える影響が大きいのはエピ/サブ界面での BPD/TED 変換点が拡大起点となる^{26,27}帯状欠陥である。そのため、ここではエピ/サブ界面における分解せん断応力の分布について議論する。

Fig. 4.15 に本デバイスのエピ/サブ界面にあたる BB'直線部における分解せん断応力分布を示す。分解せん断応力は、xyz 座標系の応力分布を結晶方位に従った座標系に変換する事により算出している。最大で約 20 MPa のせん断応力が生じることがわかった。これは、Al 電極に隙間を開けたことにより、Al 電極と SiO₂ 膜の境目で生じた大きなせん断応力の影響であると考えられる。Fig. 4.16 に B 面における滑り方向が $1/3[\bar{1}100]$ の分解せん断応力 $\tau_{\text{rss}, [1\bar{1}00]}$ の分布を示す。Al と SiO₂ の界面を起点に強いせん断応力が広く分布しており、その影響で深さ 10 μm においてもせん断応力が分布している。第6章では、この応力解析手法を用いて応力が積層欠陥拡大の臨界少数キャリア密度に与える影響について議論する。

本解析モデルはモジュール実装に伴う応力分布については考慮していないため、実際の使用条件下での応力分布を把握するためには実装を考慮したさらなる解析が必要である。また、本論文で示した応力解析手法は 4H-SiC を用いた様々なデバイス構造に対して適用可能であるが、高精度な解析を行うためには各材料の材料特性や製造過程で生じる真性応力を適切に把握する必要がある。シリコンに対して行われてきた研究と同様に SiC に対する

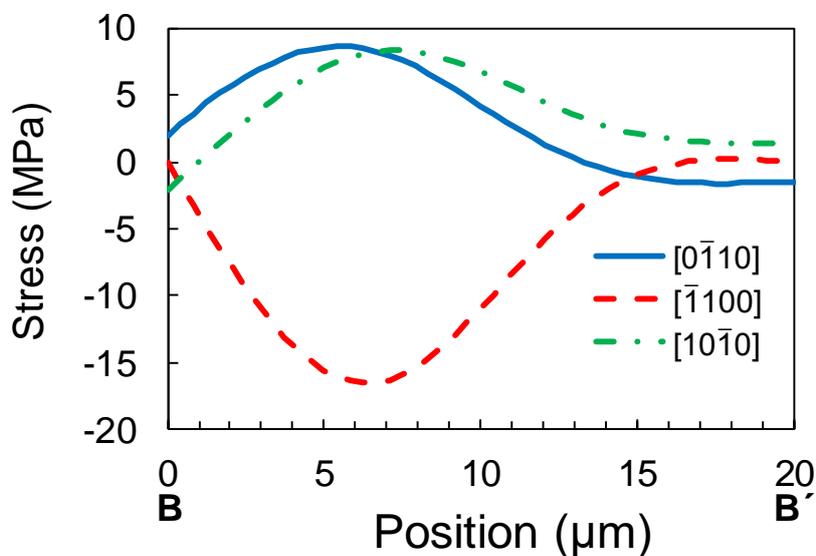


Fig. 4.15. Resolved shear stress along line BB'.

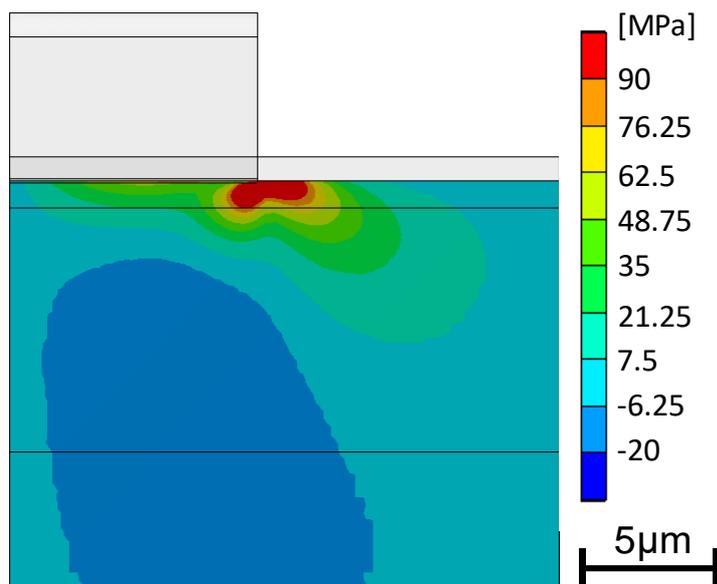


Fig. 4.16. Distribution of resolved shear stress $\tau_{\text{rss},[1100]}$ on plane B.

これらの基礎的なデータの収集が今後重要になると考えられる。

4.4. SiC-MOSFET への適用

4.4.1. SiC-MOSFET の製造プロセスの推定

開発した残留応力解析手法を SiC-MOSFET に適用した事例を示す。解析は市販されている Cree 社製 n 型 SiC-MOSFET (CPM2-1200-0025B) を対象としているが、市販品である本素子の製造プロセスは明らかにされていない。そのため本解析では、想定される一般的な製造工程を元に、文献情報やラマンシフト分布を用いた解析結果と実験結果の比較により、製造温度及び真性応力の合わせ込みを行った。想定する成膜温度、真性応力を決定する具体的な手順としては、まず一般的な製造工程や文献情報から製造温度と真性応力の妥当な範囲を決定し、次に応力解析結果とラマン分光測定結果のラマンシフト分布を比較することにより真性応力の合わせこみを行った。合わせ込みには E_2 モードの振動数変化を使用した。想定される MOSFET の製造プロセスと真性応力を Table 4.1 に示す。それぞれのプロセスの詳細は以下の通りである。

① SiC 基板の作成

まず、n 型基板の上に n⁺ のエピタキシャル成長膜を作成し、不純物ドーピング、追加エピタキシャル成長によるチャンネル層作製を行う。エピタキシャル成長層（エピ層）の不純物密

Table 4.1. Assumed MOSFET fabrication process and intrinsic stress.

	Process	Temp. (°C)	Intrinsic stress (MPa)
1	Epitaxial growth, doping, Additional epitaxial growth		10 (p layer) -50 (n ⁺ layer)
2	Gate oxide film formation	1100	0
3	Gate electrode (polySi) formation	600	500
4	Interlayer insulation (SiO ₂) formation	750	100
5	Interlayer insulation (SiN) formation	750	800
6	Ni electrode formation	22	200
7	Al pad formation	250	0
8	passivation film (SiN) formation	300	0

度, 厚さはそれぞれ $10^{13} \sim 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, $6 \sim 200 \text{ }\mu\text{m}$ 程度と想定される²⁸. エピ層では欠陥低減や基板との不純物濃度の違いに起因する応力が発生することが考えられるが, 後述するラマン分光測定では有意なラマンシフトの変化が見られなかったため, 応力は発生していないものとした. p 層, n⁺層の不純物, 不純物濃度は, それぞれ p 層に Al が $10^{15} \sim 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, n⁺層に P が $10^{16} \sim 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ 程度注入されていると考えられる. 文献²⁸およびラマン分光法測定結果との比較に従って p 層の不純物濃度を $N_{\text{Al}} = 1.0 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, n⁺層の不純物濃度を $N_{\text{P}} = 1.0 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ とする. 不純物が全て SiC の原子と置換されると仮定し, それぞれの層に生じる応力を原子間距離の変化を用いて以下の式により見積もる.

$$\sigma_f = \frac{E_{\text{SiC}}}{1 - \nu_{\text{SiC}}} \cdot \frac{2r_{\text{SiC}} - (r_{\text{Si-C}} + r_{\text{imp}})}{r_{\text{SiC}} + r_{\text{imp}}} \cdot \frac{N_{\text{imp}}}{2N_{\text{SiC}}}, \quad (4.14)$$

$$r_{\text{SiC}} = \frac{r_{\text{Si}} + r_{\text{C}}}{2}. \quad (4.15)$$

ここで N_i は濃度 (原子数密度), r_i は共有結合半径 (平衡原子間半径), E_{SiC} , ν_{SiC} はそれぞれ SiC のヤング率, ポアソン比を表す. 共有結合半径は $r_{\text{Si}} = 111$, $r_{\text{C}} = 77$, $r_{\text{Al}} = 118$, $r_{\text{P}} = 106 \text{ pm}$ であり, また $N_{\text{SiC}} = 4.83 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ である. このとき, 生じる応力は p 層で約 -10 MPa, n⁺層で約 -40 MPa と見積もられる. 但し, n⁺層では Al, P 両方のドーピングによる応力が生じると考えられるため, n⁺層には約 -50 MPa の圧縮応力が存在するものとした. チャネル層は CVD では $1500 \sim 1800 \text{ }^\circ\text{C}$ で作製され, 想定される不純物密度は, P を $10^{15} \sim 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ 程度である. 膜厚が十分薄く, 不純物濃度も低いいため, 本工程ではデバイスの応力分布に寄与するほど大きな真性応力は生じないものとした.

② ゲートの作成

次に、ゲート絶縁膜作成のため 1100 °C 程度で熱酸化が行われる。粘性流動するため、本工程では真性応力は考えず熱応力のみを考慮するものとした。

次に、LP-CVD によりゲートに p 型の Poly-Si を 500 ~ 700 °C で作成する。アモルファスシリコンの結晶化温度は 600 °C 程度であるため、次の 2 つの場合が考えられる²⁹。600 °C 以上で成膜していた場合、Poly-Si 層には基本的には圧縮応力の真性応力が生じる。その大きさは、アニールの有無などにより変化するが引張の真性応力が生じることはない。一方、600 °C 以下で成膜していた場合、多結晶シリコンに加え粒界にはアモルファスシリコンもできる。そのため、600 °C 以上となる工程 (SiO₂ やニッケルシリサイドの焼締等が考えられる) において、アモルファスシリコンの結晶化に伴う体積収縮により引張の真性応力が生じる。本解析で対象とするデバイスでは、ラマン分光測定においてゲート直下部において圧縮傾向が見られており、Poly-Si には引張応力が生じている、すなわち 600 °C 以下で成膜されていると考えられる。そのため本解析では成膜温度を 600 °C とし、熱応力に加え真性応力として 500 MPa の引張応力が Poly-Si に生じているものとした。

③ 層間絶縁膜

次に、LP-CVD により層間絶縁膜 (SiO₂ および SiN) を作成する。SiO₂ 膜の真性応力の大きさは、膜の組成などにより 0 ~ 400 MPa 程度の範囲で変化することが報告されている。解析では、SiO₂ 膜は 750 °C で成膜され、100 MPa 程度の真性応力が生じているものとした^{30,31}。SiN 膜についても同様に文献³²に従い 750 °C で成膜され約 800 MPa の真性応力が生じるものとした。

④ コンタクトメタル、電極パッド

続いて Ni 電極を作成する。スパッタ後に約 1000 °C で焼締、シリサイド化が行われる。4.3.1 で示した測定結果では膜厚 120 nm で約 1150 MPa の真性応力が生じていた。シリサイド化による応力は界面に集中すると考えられるが、本解析では簡単のため膜厚 800 nm で平均化し、室温で約 200 MPa の応力が生じるものとした。

最後に Al 電極、SiN 保護膜がそれぞれ 250 °C、300 °C で成膜される。これらで生じる真性応力は Al の塑性変形で吸収されると考えられるため、本解析では考慮していない。

4.4.2. 解析条件

FEM 解析に用いたモデルを Fig. 4.17 に示す。要素数、節点数はそれぞれ 35640 要素、154705 節点である。拘束条件、ラマンシフト変化量の分布への変換方法については 4.2.4 で示した pin ダイオードの解析と同様である。Table 4.2 に解析に用いた材料定数を示す。4.3.1 で測定を行ったニッケルシリサイド膜および CVD で作成された SiO₂ 膜に加え、SiC 上に熱酸化で作成された SiO₂ 膜についても材料定数の測定を行った。

顕微ラマン分光測定は Fig. 4.18 に示す電極直下の $15\ \mu\text{m} \times 15\ \mu\text{m}$ の領域に対して水平方向に $0.5\ \mu\text{m}$ 間隔 (31 点), 垂直方向に $1\ \mu\text{m}$ 間隔 (16 点) の合計 496 点で行われた. 測定条件は 4.2.3 で示した pin ダイオードの測定と同様である

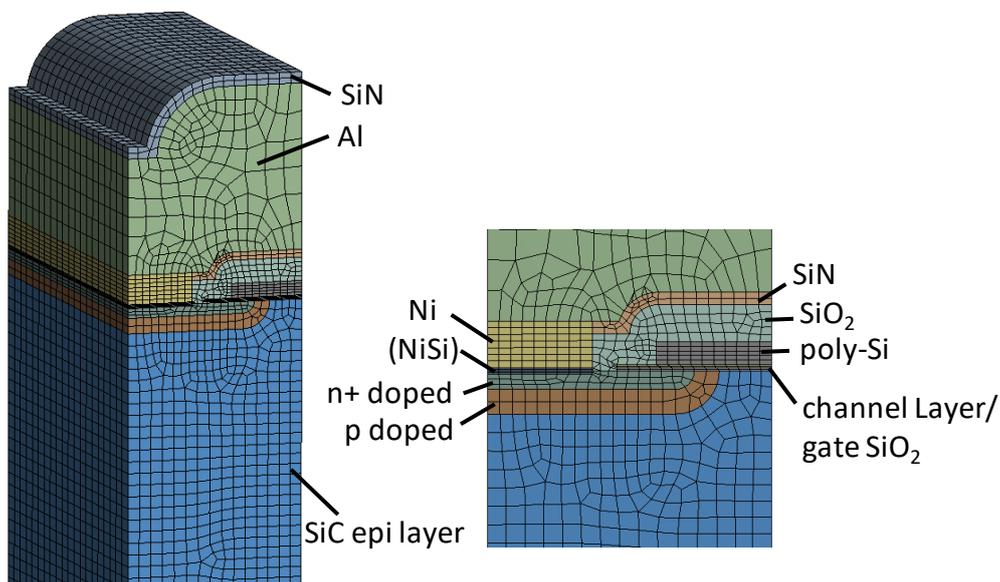


Fig. 4.17. FEM analysis model of SiC-MOSFET.

Table 4.2 Material properties used in the stress analysis of SiC-MOSFET.

	Young's modulus [GPa], Poisson's ratio	Linear expansion coefficient [$\times 10^{-6}/^{\circ}\text{C}$]	Yield stress [MPa]
SiC ²⁰	$C_{11} = 507, C_{33} = 547, C_{44} = 159,$ $C_{12} = 108, C_{13} = 52$ [GPa]	$\alpha_{11} = 4.47,$ $\alpha_{33} = 4.06$	-
SiO ₂ (Thermal oxidation)	$E = 87.5, \nu = 0.2$	$\alpha = 1.99$	-
SiO ₂ (CVD)	$E = 81.9, \nu = 0.2$	$\alpha = 0.48$	-
Poly-Si ²³	$E = 170, \nu = 0.22$	$\alpha = 3.53$	-
SiN ²³	$E = 280, \nu = 0.28$	$\alpha = 2.57$	-
Ni (NiSi)	$E = 203, \nu = 0.3$	$\alpha = 10.2$	-
Al ^{22,23}	$E = 70, \nu = 0.35$	$\alpha = 25.8$	$\sigma_Y = 185$

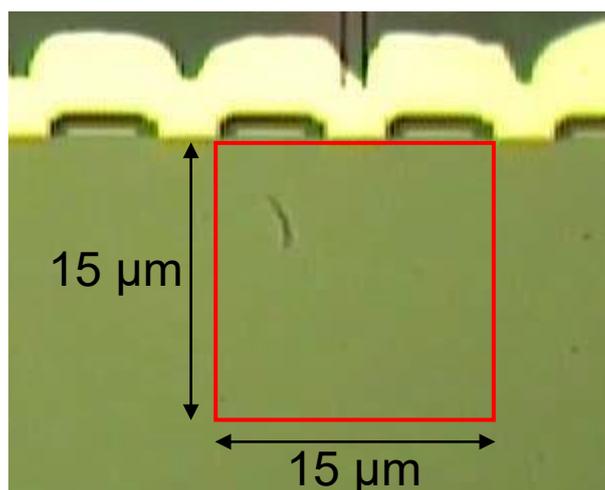


Fig. 4.18. Measurement area of Raman spectroscopy to SiC-MOSFET.

4.4.3. 解析結果

E_2 モードについてラマン分光測定と応力解析により得られたラマンシフト分布の比較を Fig. 4.19 に示す. まず, 深さ $3\ \mu\text{m}$ 以上の領域では優位なラマンシフトは見られないという測定結果の特徴については, エピタキシャル成長による n -層作成では真性応力が生じないと想定したことにより解析においても再現することができた. 次に, SiC と電極界面ではゲート・ドレイン間において解析の方が低波数側への振動数変化が大きくなっている点を除けば定量的にも概ね一致しており, 解析結果が測定により得られたラマンシフト分布をよく再現していることがわかる. ゲート・ドレイン間の低波数側へのシフトが解析の方が大きくなっている原因としては, 本解析で想定した製造工程や真性応力が実際のもものと異なっている可能性が考えられる. 特にゲート・ドレイン間の応力分布に影響するプロセスは, ポリシリコン成膜, ニッケル成膜, 層間絶縁 SiO_2 膜の成膜, p 層, n^+ 層のドーピングと多岐にわたるため, 原因の特定は難しい.

応力解析で得られた垂直応力の分布を Fig. 4.20 に示す. まず, 電極からの距離が $3\ \mu\text{m}$ 以上離れている領域には応力がかかっていない. 次に電極との界面付近では, 以下のような結果であった. ゲート下部の応力は σ_{xx} , σ_{yy} がそれぞれ $-60\ \text{MPa}$, $-15\ \text{MPa}$ 程度であった. これは主にポリシリコンの熱応力と結晶化による収縮に起因している. ドレイン下部では応力は σ_{xx} , σ_{yy} がそれぞれ $-140\ \text{MPa}$, $-70\ \text{MPa}$ 程度であった. これは主にニッケルのシリサイド化による体積収縮が原因である. また, ゲート下部とドレイン下部の間には x 方向に最大 $250\ \text{MPa}$ 程度の応力がかかっていることがわかった. この応力は隣接するポリシリコンとニッケルの収縮の収縮に加え, 層間絶縁用の SiO_2 膜の熱応力に起因している.

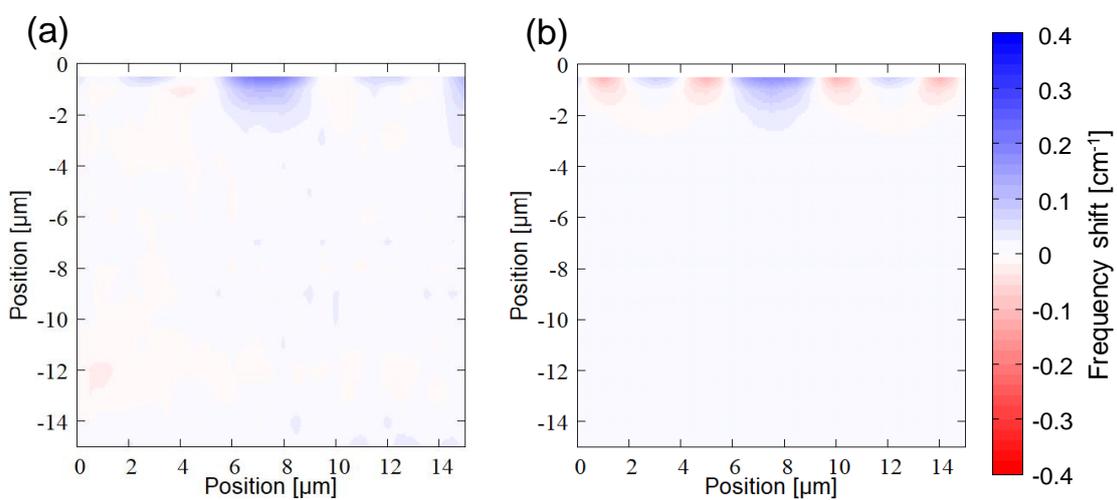


Fig. 4.19. Frequency shift distribution of E₂ mode obtained by (a) Raman spectroscopy measurement and (b) stress analysis.

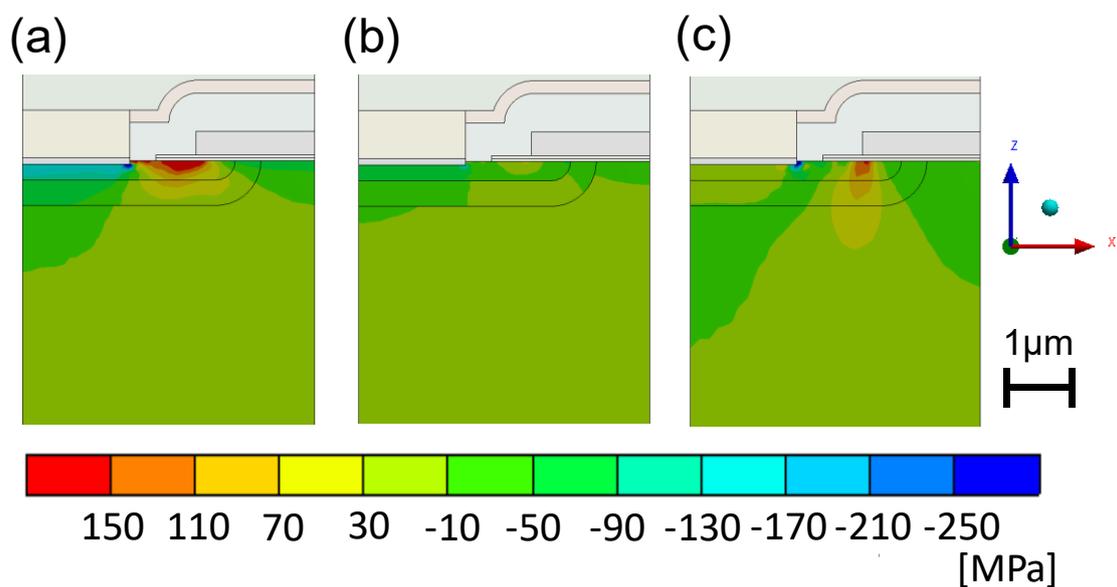


Fig. 4.20. Distributions of (a) σ_{xx} , (b) σ_{yy} , and (c) σ_{zz} near the electrode.

4.5. 本章のまとめ

第4章では、4H-SiC パワーデバイス内部の残留応力分布を明らかにする解析手法の開発を行った。FEM 上で製造プロセスを再現した応力解析、第3章で求めたフォノン変形ポテンシャルを用いた応力テンソルのラマンシフト変化への変換、顕微ラマン分光法による実デバイスのラマンシフト変化分布の測定を組み合わせることにより、応力解析の妥当性を確認した上で、パワーデバイス内部の応力分布を成分毎に分解して明らかにすることが可能となった。製造プロセスが開示されている pin ダイオードを対象に応力解析を行い、より高精度な解析を可能とするため、デバイスと同じプロセスで作成された平坦膜サンプルに対しナノインデンテーションおよび反り測定を行うことにより SiC 上に作成した薄膜の材料定数や真性応力を明らかにした。ラマンシフト分布について FEM 解析結果と測定結果と比較することにより、FEM による応力解析の妥当性の確認を確認した。応力解析の結果、今回対象とした pin ダイオードには、電極直下部においてはニッケル電極直下で最大 240MPa の圧縮応力が、SiO₂ 下部で最大 60MPa の引張応力が生じていることがわかった。これらの応力分布は Al 及び SiO₂ と SiC の線膨張係数差、および Ni のシリサイド化による影響によると考えられる。また、エピ/サブ界面では最大 20MPa 程度のせん断応力が生じる事がわかった。また、開発した応力解析手法を市販の SiC-MOSFET に適用し、4H-SiC を用いた様々なデバイス構造に対して本解析が適用可能であることを示した。

本章の参考文献

- ¹ A. Yagishita, T. Saito, S. Matsuda, and Y. Ushiku, *Jpn. J. Appl. Phys.* **36**, 1335 (1997).
- ² M. Yoshikawa, M. Maegawa, G. Katagiri, and H. Ishida, *J. Appl. Phys.* **78**, 941 (1995).
- ³ E. Bonera, M. Fanciulli, and G. Carnevale, *J. Appl. Phys.* **100**, 033516 (2006).
- ⁴ V. Senez, A. Armigliato, I. De Wolf, G. Carnevale, R. Balboni, S. Frabboni, and A. Benedetti, *J. Appl. Phys.* **94**, 5574 (2003).
- ⁵ T. Tada, V. Poborchii, and T. Kanayama, *J. Appl. Phys.* **107**, 113539 (2010).
- ⁶ T. Tawara, S. Matsunaga, T. Fujimoto, M. Ryo, M. Miyazato, T. Miyazawa, K. Takenaka, M. Miyajima, A. Otsuki, Y. Yonezawa, T. Kato, H. Okumura, T. Kimoto, and H. Tsuchida, *J. Appl. Phys.* **123**, 025707 (2018).
- ⁷ A. Okada, J. Nishio, R. Iijima, C. Ota, A. Goryu, M. Miyazato, M. Ryo, T. Shinohe, M. Miyajima, T. Kato, Y. Yonezawa, and H. Okumura, *Jpn. J. Appl. Phys.* **57**, 061301 (2018).
- ⁸ A. Goryu, A. Kano, M. Kato, C. Ota, A. Okada, J. Nishio, S. Izumi, and K. Hirohata, *Mater. Sci. Forum* **963**, 288 (2019).
- ⁹ P.B. Ghate and L.H. Hall, *J. Electrochem. Soc.* **119**, 491 (1972).

- ¹⁰ D.S. Gardner and P.A. Flinn, *IEEE Trans. Electron Devices* **35**, 2160 (1988).
- ¹¹ W.C. Oliver and G.M. Pharr, *J. Mater. Res.* **7**, 1564 (1992).
- ¹² L.B. Freund and S. Suresh, *Thin Film Materials* (Cambridge University Press, Cambridge, 2004).
- ¹³ R.J. Briggs and A.K. Ramdas, *Phys. Rev. B* **13**, 5518 (1976).
- ¹⁴ R. Loudon, *Adv. Phys.* **50**, 813 (2001).
- ¹⁵ S. Nakashima, A. Wada, and Z. Inoue, *J. Phys. Soc. Japan* **56**, 3375 (1987).
- ¹⁶ G. Wei, S. Varghese, K. Beaman, I. Vasilyeva, T. Mendiola, A. Carswell, D. Fillmore, and S. Lu, in *2010 IEEE Work. Microelectron. Electron Devices* (IEEE, 2010), pp. 1–4.
- ¹⁷ H. Sunami, Y. Itoh, and K. Sato, *J. Appl. Phys.* **41**, 5115 (1970).
- ¹⁸ M. Qin and V.M.C. Poon, *J. Mater. Sci. Lett.* **19**, 2243 (2000).
- ¹⁹ D. Smeets, G. Vanhoyland, J. D’Haen, and A. Vantomme, *J. Phys. D. Appl. Phys.* **42**, 235402 (2009).
- ²⁰ K. Kamitani, M. Grimsditch, J.C. Nipko, C.K. Loong, M. Okada, and I. Kimura, *J. Appl. Phys.* **82**, 3152 (1997).
- ²¹ Z. Li and R.C. Bradt, *J. Appl. Phys.* **60**, 612 (1986).
- ²² A.I. Sauter and W.D. Nix, *IEEE Trans. Components, Hybrids, Manuf. Technol.* **15**, 594 (1992).
- ²³ The Japan Society of Mechanical Engineers, *JSME Data Book: Heat Transfer*, 5th Editio (Maruzen Publishing Co.,Ltd., Tokyo, 2009).
- ²⁴ V. Poborchii, T. Tada, and T. Kanayama, *Appl. Phys. Lett.* **91**, 241902 (2007).
- ²⁵ H. Matsuhata and T. Sekiguchi, *Philos. Mag.* **98**, 878 (2018).
- ²⁶ 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, *J. Appl. Phys.* **119**, 095711 (2016).
- ²⁷ S. Hayashi, T. Naijo, T. Yamashita, M. Miyazato, M. Ryo, H. Fujisawa, M. Miyajima, J. Senzaki, T. Kato, Y. Yonezawa, K. Kojima, and H. Okumura, *Appl. Phys. Express* **10**, 081201 (2017).
- ²⁸ Cree Inc., JP5265111 (2013).
- ²⁹ P.J. French, *Sensors Actuators A Phys.* **99**, 3 (2002).
- ³⁰ M. Stadtmueller, *J. Electrochem. Soc.* **139**, 3669 (1992).
- ³¹ G. Smolinsky and T.P.H.F. Wendling, *J. Electrochem. Soc.* **132**, 950 (1985).
- ³² P. Temple-Boyer, C. Rossi, E. Saint-Etienne, and E. Scheid, *J. Vac. Sci. Technol. A Vacuum, Surfaces, Film.* **16**, 2003 (1998).

第5章 積層欠陥エネルギーの温度依存性の推定

5.1. 緒言

第2章で述べたように、順方向劣化現象における積層欠陥の拡大/縮小はQWAモデルによる実効的な積層欠陥エネルギーの変化で解釈可能であると考えられる。しかしながら、QWA効果によるエネルギー利得については理論計算によりその温度、不純物濃度、少数キャリア密度への依存性は定量的に明らかにされてきている¹⁻³一方で、4H-SiCの積層欠陥エネルギーの温度依存性はまだ不明な部分が多い。実験的には1300℃における測定結果が報告されている⁴が、順方向劣化問題が生じる室温～300℃程度のデバイス動作温度域については実験結果の報告はない。これは常温では転位が不動であるため、部分転位対間の平衡距離を実験的に測定することが困難であることに起因する。積層欠陥エネルギーの温度依存性の傾向は半導体材料によって異なる^{5,6}ため、高温での測定結果のみから室温での積層欠陥エネルギーを予測することも難しい。また、転位移動が活発となるREDG下ではQWA効果の影響を受けるため、積層欠陥エネルギーの測定はできない。そのため、低温における積層欠陥エネルギーを理論計算によって予測することが期待される。第一原理計算を用いた積層欠陥エネルギーの計算は、4H-SiCに対してはIwata⁷らによる静止状態での計算結果が報告されている。ポリタイプである3C-SiCについてはUmeno⁸らにより同様に静止状態において不純物や応力の影響に関する計算が行われている。4H-SiCの積層欠陥エネルギーの温度依存性の予測についてはThomas⁹らが行った結果が報告されている。しかしながらこの結果では、約600Kより高温では積層欠陥エネルギー自体が負の値となってしまっており実験⁴と矛盾する結果を示している。このように、4H-SiCの積層欠陥エネルギーの温度依存性については計算が可能であるとは示されている一方で十分に正確な値が得られていないのが現状である。

第5章では、4H-SiCの積層欠陥エネルギーの温度依存性を明らかにすることを目的に、第一原理計算を用いたフォノンの自由エネルギーの計算を行った。4H-SiCの積層欠陥として考えられるシングルショックレー型積層欠陥とダブルショックレー型積層欠陥それぞれについて計算を行った。Thomasらが行った体積を固定した調和振動近似を用いる計算手法を基本に、計算精度を向上させるため、計算条件に関する収束性の検討を行った。また、1000K以上の高温では熱膨張が影響する可能性があるため、自由エネルギーの計算に熱膨

張を考慮した擬調和振動近似を用いた計算を行い、熱膨張が積層欠陥エネルギーへと与える影響の検討を行った。得られた結果を報告されている QWA 効果の計算結果と組み合わせることにより、順方向劣化問題における積層欠陥拡大の臨界少数キャリア密度の理論的予測を行った。得られた臨界少数キャリア密度について、実験結果との比較、考察を行なった。

5.2. 計算手法

5.2.1. 調和振動近似

ある温度 T における積層欠陥エネルギー γ_{SF} は積層欠陥のある結晶の自由エネルギー $F_{\text{fault}}(T)$ と完全結晶の自由エネルギー $F_{\text{perfect}}(T)$ の単位面積当たりの差で与えられる。積層欠陥の面積を A とすると、 γ_{SF} は以下の式で求める事ができる。

$$\gamma_{\text{SF}}(T) = \frac{F_{\text{fault}}(T) - F_{\text{perfect}}(T)}{A}. \quad (5.1)$$

体積 V におけるヘルムホルツの自由エネルギー $F(V, T)$ は式(5.2),

$$F(V, T) = E(V) + F_{\text{ele}}(V, T) + F_{\text{vib}}(V, T), \quad (5.2)$$

で与えられる。ここで、 $E(V)$ は 0 K における凝集エネルギー、 $F_{\text{vib}}(T)$ はフォノンの寄与、 $F_{\text{ele}}(V, T)$ は熱電的な寄与である。 $F_{\text{ele}}(V, T)$ は金属では重要な寄与を果たすが、半導体や絶縁体ではフェルミ準位に電子が存在しないことから影響は無視できるものと考えられる。そのため、本研究ではヘルムホルツの自由エネルギーを $E(V)$ と $F_{\text{vib}}(V, T)$ の和と定義した。第一原理計算では $F_{\text{vib}}(V, T)$ は式(5.3),

$$F_{\text{vib}}(V, T) = \frac{k_B T}{N_q} \sum_{q,i} \log \left[2 \sinh \left(\frac{\hbar \omega_{iq}}{2k_B T} \right) \right], \quad (5.3)$$

で求める事ができる¹⁰。ここで、 N_q 、 $\omega_i q$ 、 k_B 、 \hbar はそれぞれ q 点の数、波数ベクトル q の振動数、ボルツマン定数、プランク定数である

Fig. 5.1 に本研究で使用した原子の配置を示す。4H-SiC の最小構造は第3章でも使用したように4つの Si-C バイレイヤー（合計8原子）からなる。本研究では、積層欠陥を有する構造の c 軸方向の周期構造を12 Si-C バイレイヤーとした。これは完全結晶のユニットセルを c 軸方向に3周期積層した構造に対応する。Fig. 5.1(b), (c) はそれぞれシングルショックレー型積層欠陥 (SSSF) が含まれた構造で、積層欠陥の存在する位置により Zhdanov 記法を用いて SSSF(3, 1) と SSSF(1, 3) の2種類に分けられる。Fig. 5.1(d) はダブルショックレー型積層欠陥 (DSSF) が含まれた構造で、シングルショックレー型の積層欠陥が2層連続する構造となっている。これらの積層欠陥の構造は2.3.2 で説明したものと同一である。

第一原理計算に密度汎関数法 (DFT) を用い、第3章と同様に計算コードには PHASE/0¹¹ を使用した。交換相関汎関数については第3章で用いた LDA 法から Generalized Gradient Approximation (GGA) 法へと変更した。これは、一般にエネルギーについては GGA の方が精度を高く求めやすいことに加え、3C-SiC の積層欠陥エネルギーに関する先行研究⁸において、LDA と GGA の比較の結果 GGA の方が精度が良いとされていた事などが理由である。ただし、第3章で示したように 4H-SiC のフォノン振動数については LDA 法により非常に良い精度で計算が行える。しかしながら、一般に LDA 法と GGA 法の違いに起因するフォノンの自由エネルギーの差は僅かである¹² ことから、LDA を GGA に変更したことによりフォノンの自由エネルギーに与える影響は小さいと考えている。LDA と GGA を用いた計算結果の具体的な比較については、付録 A に記す。Thomas らの先行研究⁹ に対して精度を向上させるため、凝集エネルギーのみを用いて計算した積層欠陥エネルギーが、計算条件に対して 1 mJ/m² 以内で収束するように k 点、カットオフエネルギーを決定した。波動関数のカットオフエネルギーは 36 hartree とし、 k 点は 8 原子から成る完全結晶 (Fig. 5.1(a)) では 12×12×3 点を、24 原子から成る積層欠陥を持つ結晶 (Fig. 5.1(b),(c),(d)) では 12×12×1 点を Monk-horst Pack 法により設定した。格子長はエネルギー最小化計算により決定し、得られた格子長は $a=3.092 \text{ \AA}$, $c/a=3.274$ であった。フォノン計算では、スーパーセルを Fig. 5.1(a) で示した完全結晶については 3×3×3, Fig. 5.1(b), (c), (d) で示した積層欠陥を含む構造では 3×3×1 と設定し、 q 点はそれぞれ 100×100×30 点, 100×100×10 点とした。

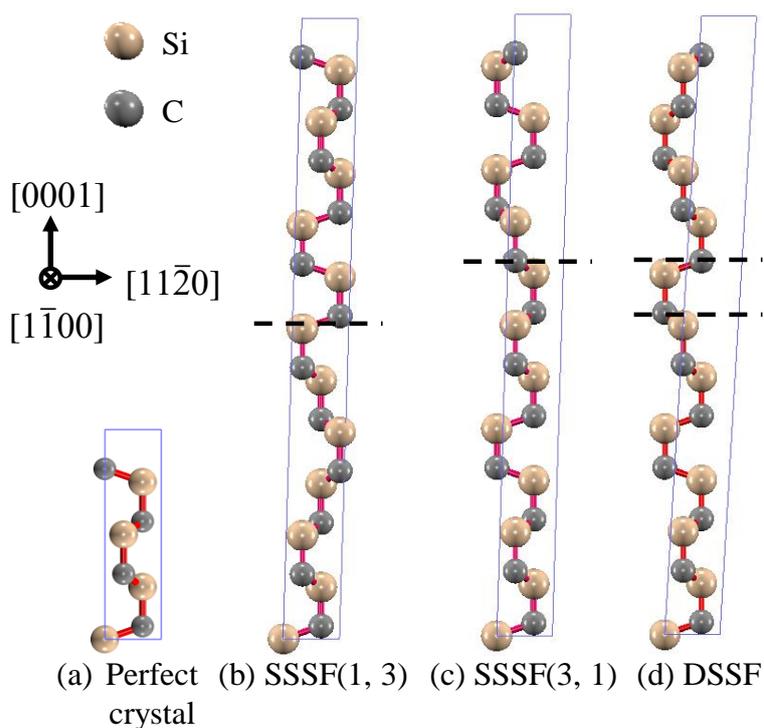


Fig. 5.1. 4H-SiC unit cell structures of (a) a perfect crystal and crystals with (b) SSSF(3, 1), (c) SSSF(1, 3), and (d) DSSF. The dashed lines indicate the positions of the stacking faults.

5.2.2. 擬調和振動近似

高温での自由エネルギーを検討するためには、フォノンの非調和振動に起因する熱膨張による体積変化を考慮する必要がある。熱膨張による体積変化を考慮したギブスの自由エネルギー $G(T)$ は次の式(5.4),

$$G(T) = \min_V [F(V, T) + PV] \approx \min_V F(V, T), \quad (5.4)$$

によって与えられる。ここで P は圧力である。通常圧力下では PV は無視できるため、 $G(T)$ を求めるためには、温度 T の下で $F(V, T)$ を最小化すれば良い。このような V をそれぞれの温度により探索することにより、材料の熱膨張係数や熱ひずみを計算的にもとめることができる。このとき、温度 T における積層欠陥エネルギーは、式(5.4)を最小化する格子長を用いて式(5.1)~(5.3)に従い計算を行うことで求める事ができる。温度が融点に近い場合には、擬調和振動近似で考慮できない高次の非調和振動の影響についても考慮する必要があるが、4H-SiCの融点は2730 °C¹³であるため、本研究で対象とする2000 °C以下の範囲であれば自由エネルギーの計算における擬調和振動近似は十分適用可能であると考えられる。

熱膨張の計算条件について述べる。Fig. 5.1(a)で示した完全結晶を用いて、 a 軸、 c 軸それぞれについて格子長を安定格子長の1.0~1.02倍までの範囲で0.25%刻みで変化させた合計81点において、原子位置を緩和したのちフォノン計算を行い自由エネルギー $G(V(a, c))$ を求めた。それぞれの温度 T において

$$G(V(a, c), T) = \sum_{i=0}^5 \sum_{j=0}^{5-i} k_{i,j} a^i c^j, \quad (5.5)$$

を用いてフィッティングを行い $G(V(a, c), T)$ が最小となる格子長を最小二乗法により求めその温度 T における安定格子長とした。本計算ではスーパーセルのサイズを $3 \times 3 \times 1$ とした。このセルサイズでは、積層欠陥エネルギーの計算に用いたモデルに対しては c 軸の周期長さが1/3倍になるが、スーパーセルを含めた系の大きさが立方体に近い形状になっている。計算で得られた1500 K, 1800 K, 2100 Kにおける格子長を用いて積層欠陥エネルギーの計算を行った。その他の計算条件は5.2.1と同様である。

5.3. 結果と考察

5.3.1. フォノンが積層欠陥エネルギーへ与える影響：調和振動近似

Table 5.1に0 KにおけるSSSF, DSSFそれぞれの積層欠陥エネルギーの計算結果を示す。0 Kではフォノンの寄与はゼロ点振動に限られるため非常に小さく、0 Kにおける積層欠陥

Table 5.1 Comparison of Stacking energy at 0 K. The values in parentheses indicate the contribution of the difference in cohesive energy. For comparison, the results of previous studies^{15,16} calculated using the cohesive energy are also shown.

SF energy (contribution of cohesive energy)	SSSF(3, 1)	SSSF(1, 3)	DSSF
This work	14.8 (15.1)	15.0 (15.3)	8.1 (7.3)
Previous study	17.7	18.1	22.4

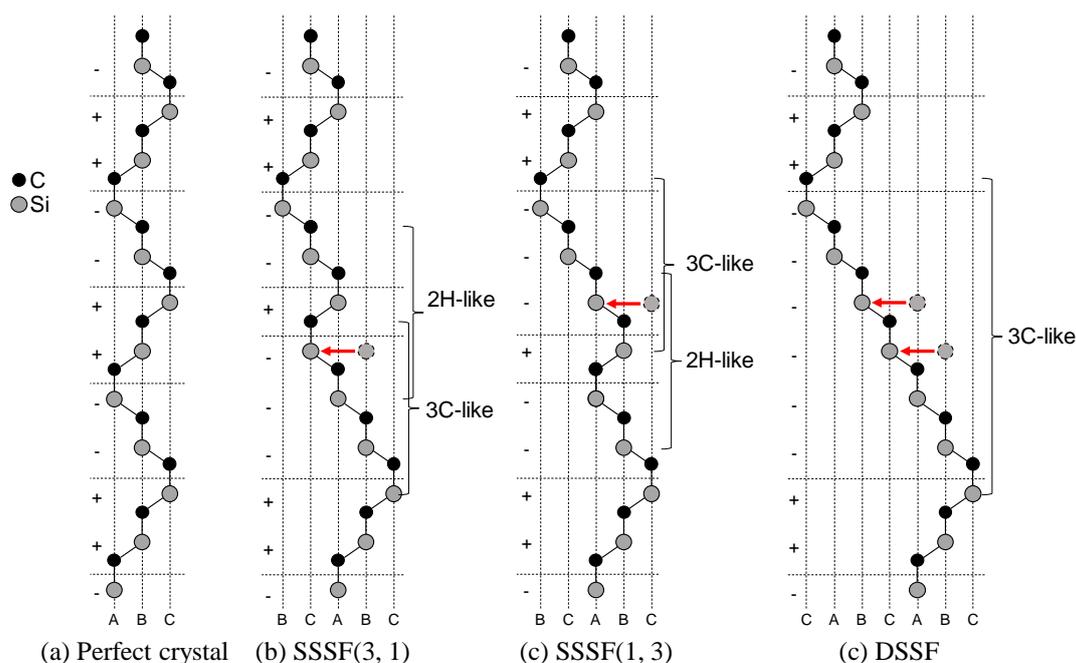


Fig. 5.2. Stacking sequences of (a) perfect crystal of 4H-SiC, crystals with (b) SSSF(3, 1), (c) SSSF(1, 3) and (d) DSSF. The arrows indicate the glide direction of atoms.

エネルギーはほとんど凝集エネルギーにより決定されている事がわかる。また、DSSFの積層欠陥エネルギーの方が小さかった。これは、SSSFとDSSFの積層構造の特徴の違いに起因すると考えられる。Fig. 5.2に、(a)完全結晶、(b)SSSF(3, 1)、(c)SSSF(1, 3)、(d)DSSFの積層構造を示す。DSSFは3C-likeな直線状の積層構造のみが挿入されているのに対し、SSSFは3C-likeな直線状の積層構造を持つ領域と2H-likeなジグザグな積層構造を持つ領域から成り立っていることがわかる。過去の研究¹⁴により結晶のエネルギーは2H > 3C > 4Hの順に高いことがわかっている。そのため、部分的に2H-likeな構造を持つSSSF構造の方が積層欠陥エネルギーが高くなったものと考えられる。

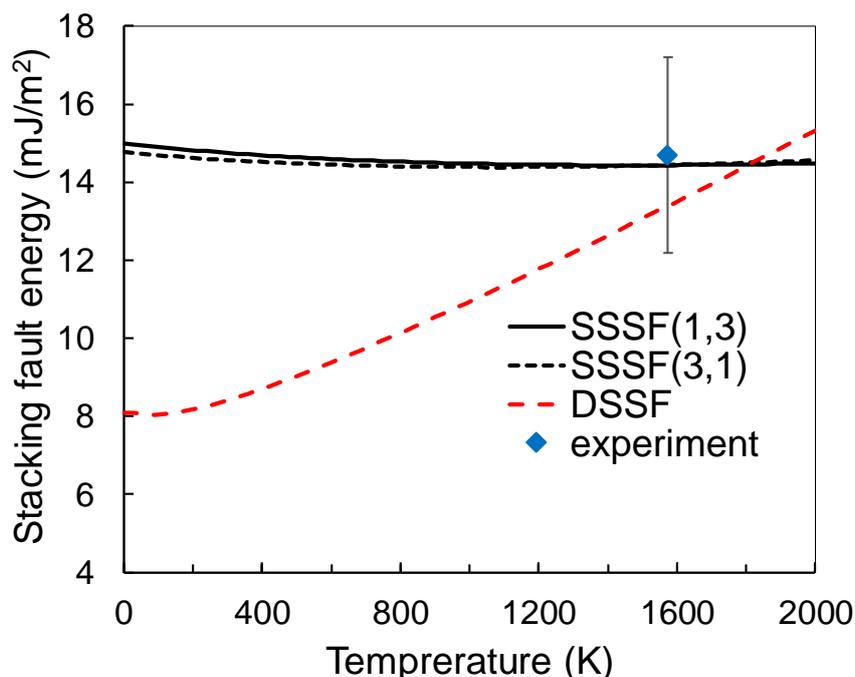


Fig. 5.3. The dependence of stacking fault energy on temperature calculated with harmonic approximation. The experimental results of Hong et al. ⁴ are presented together with the stated uncertainties.

凝集エネルギーのみを用いて計算された結果^{15,16}との比較では、SSSFの積層欠陥エネルギーは良い一致を示している一方で、DSSFについては積層欠陥エネルギーの値は先行研究¹⁵とは異なっていた。先行研究と本研究の計算条件の違いは、計算に使用した原子数、擬ポテンシャル、 k 点数、カットオフエネルギーの4つである。確認のため、先行研究と同じ96原子での計算も行ったが、DSSFの積層欠陥エネルギーは24原子の場合と殆ど同じであった。5.2.1でも述べたように我々の計算では、先行研究で使用された k 点数(6点)では精度のよい積層欠陥エネルギーは得られなかったことから、計算精度の違いが結果に影響している可能性がある。

Fig. 5.3に調和振動近似で求められた積層欠陥エネルギーの温度依存性を示す。SSSF(1,3)とSSSF(3,1)の結果に違いがないことから積層欠陥の存在する位置の違いは積層欠陥エネルギーには影響を与えないことがわかる。そのため、以降はSSSFについてはSSSF(1,3)のみを用いて検討を行う。0 K, 300 K, 600 KにおけるSSSFの積層欠陥エネルギーはそれぞれ、15.0, 14.8, 14.6 mJ/m²で、SSSFの積層欠陥エネルギーは温度依存性が小さいことがわかった。また、高温での値は実験値⁴と良い一致を示した。一方でこれらの結果は、同様に第一原理計算によって4H-SiCの積層欠陥エネルギーの温度依存性を計算したThomasらの先行研究⁹とは大きく異なる結果であった。平面方向のスーパーセルを2×2とした計算結果で

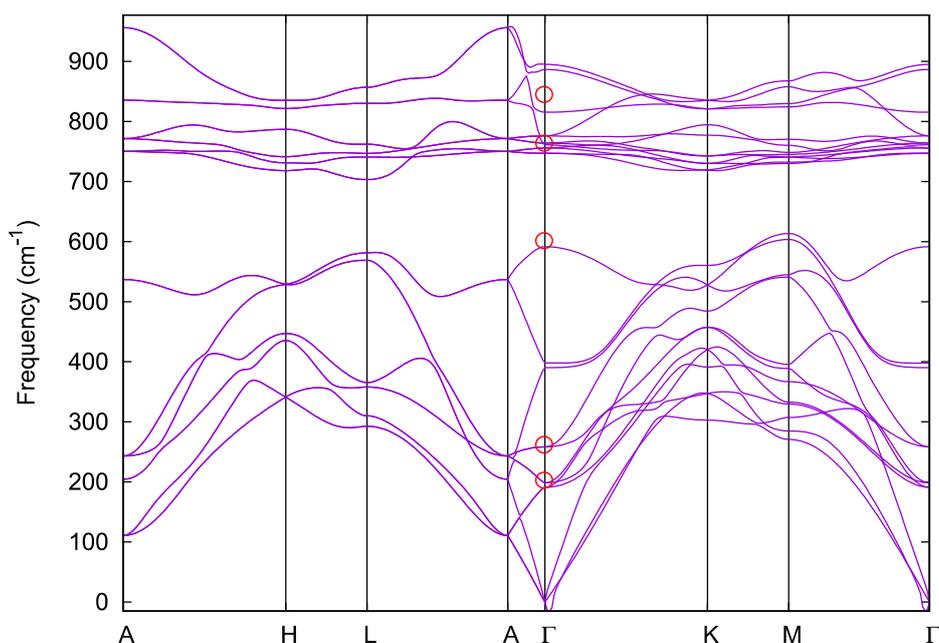


Fig. 5.4. Phonon dispersion curves of 4H-SiC. The size of the supercell is $3 \times 3 \times 3$. Red circles are the experimental results.¹⁷

は、先行研究と似た曲線が得られたことから、先行研究で行われた計算条件では精度が不十分であった可能性が考えられる。

Fig. 5.4 に完全結晶のフォノン分散曲線を示す。音響モードについては実験値¹⁷よりわずかに低いものの、その差は5%以内であった。これはGGAを擬ポテンシャルに用いた計算では振動数が実験に比べ小さく計算されやすい傾向があるためと考えられる¹²。 Γ -Mの分散パスについて Γ 点付近でわずかに虚数モードが見られたため、スーパーセルの大きさによるフォノン分散の収束性の確認を行った。 Γ -Mのパスは c 軸に垂直な方向のフォノン分散に対応するため、スーパーセルの大きさを $2 \times 2 \times 1$, $3 \times 3 \times 1$, $4 \times 4 \times 1$ と変化させたものを用いて計算を行った。結果をFig. 5.5に示す。K点付近に注目すると、(a)に示す $2 \times 2 \times 1$ スーパーセルの音響モードのフォノン分散は(b), (c)とは大きく異なっていたが、(b)と(c)では似た分散曲線が得られた。これに加え、高温における積層欠陥エネルギーの値も実験値と一致していることから、平面方向のスーパーセルサイズを 3×3 とした計算結果は妥当であると考えている。 Γ 点の僅かな虚数モードはSiCがイオン結合性であるため、長距離の相互作用の影響を受けている可能性が考えられる。ただし、先行研究¹⁸では同じ大きさのスーパーセルでも虚数モードが無い分散曲線が示されており、これは第一原理計算の計算誤差に由来する可能性も考えられる。どちらの場合でも、本研究で対象としている積層欠陥エネルギーは、積層欠陥のある系とない系の自由エネルギーの差から求められるため、計算ソフトやアルゴリズム等に由来する僅かな系統誤差が結果に与える影響は小さいと考えられる。

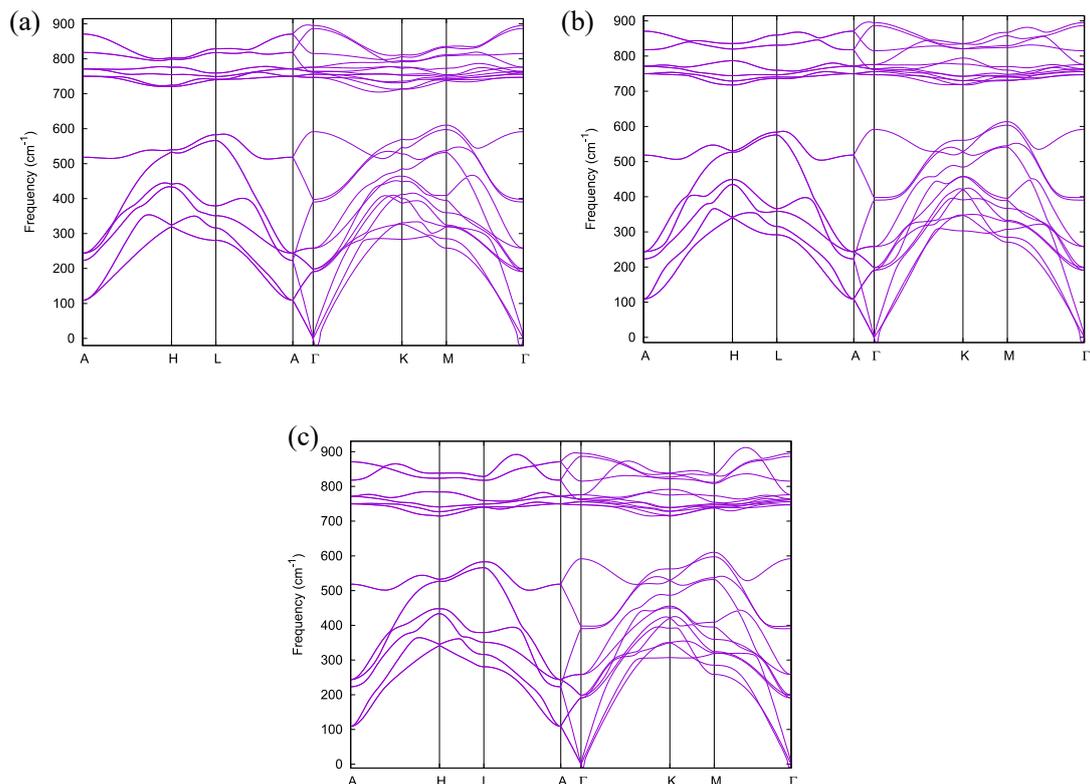


Fig. 5.5. Phonon dispersion curves obtained with (a) $2 \times 2 \times 1$, (b) $3 \times 3 \times 1$, and (c) $4 \times 4 \times 1$ supercells. (a) draws a different curve focusing on the acoustic mode around the K point. Since this calculation is for confirming the convergence of the supercell size in the direction perpendicular to the c -axis, the length of the supercell along the c -axis, which has less influence, is shortened. Therefore, the frequency of the optical mode differs from that in Fig. 2.

順方向劣化現象と同様に 4H-SiC 中の積層欠陥が自発的に拡大する現象として、N を高密度ドープした結晶で見られる DSSF の自発的な拡大^{19,20}がある。これは、N を $2 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ 以上ドープされた 4H-SiC 結晶を $1100 \text{ }^\circ\text{C}$ 以上に加熱すると DSSF が自発的に拡大し、一方で約 $1800 \text{ }^\circ\text{C}$ まで加熱すると DSSF が縮小する²¹という現象である。この現象も QWA で理解可能である¹と考えられている。そのため、DSSF の拡大/縮小の定量的な解明には高温における DSSF の積層欠陥エネルギーが重要となる。

本計算の結果、DSSF の場合には温度が上昇するにつれて積層欠陥エネルギーも大きくなることがわかった。Fig. 5.6 に完全結晶と積層欠陥を持つ 4H-SiC のフォノンの状態密度 (DOS : Density of states) の比較を示す。 300 cm^{-1} 付近で僅かに DOS が異なっていることがわかる。結晶欠陥の無い 4H-SiC では約 300 cm^{-1} と約 350 cm^{-1} に DOS が集中している。これに対し、DSSF がある場合には約 300 cm^{-1} のピークが減少し、高波数側の DOS が増加していることがわかる。そのため、DOS が高波数側へとシフトしたことにより完全結晶よりも

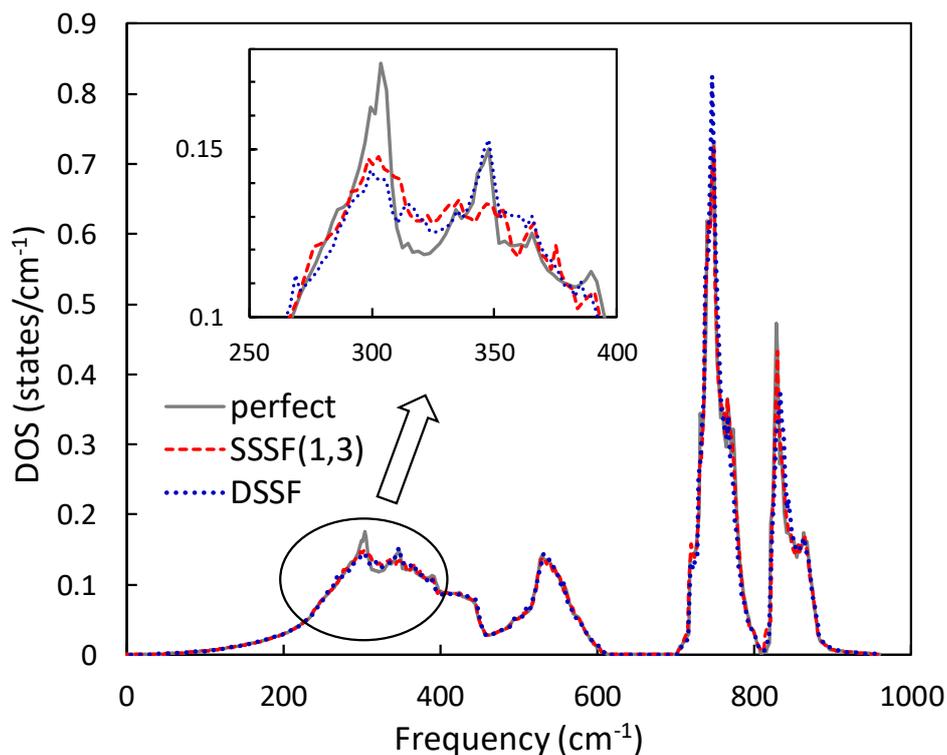


Fig. 5.6. The phonon DOS of 4H-SiC with a perfect crystal and crystals with stacking faults. The DOS around 300 cm⁻¹ is slightly different depending on the crystal structure.

DSSFの方がフォノンの自由エネルギーは大きくなる。ヘルムホルツの自由エネルギーに対するフォノンの自由エネルギーの寄与は温度が上昇するにつれて大きくなるため、Fig 5.2に示したように両者の自由エネルギーの差である積層欠陥エネルギーも温度上昇により大きくなったと考えられる。一方、SSSFの場合には約 300 cm⁻¹と約 350 cm⁻¹のDOSのピークが両方とも減少し、その間のDOSが増加している。そのため、約 300 cm⁻¹のDOSが高波数側へとシフトした影響と約 350 cm⁻¹のDOSが低波数側へとシフトした影響が重なり、完全結晶とSSSFのフォノンの自由エネルギーの差がDSSFの場合に比べて小さくなり、積層欠陥エネルギーが殆ど温度の影響を受けないという結果を生んだものと考えられる。4H-SiCの積層欠陥エネルギーは小さいため、この僅かなDOSの違いによりSSSFとDSSFの温度依存性に違いが生まれたと考えられる。

5.3.2. 積層欠陥エネルギーに熱膨張が与える影響：擬調和振動近似

Fig. 5.7に本研究で得られた線膨張係数を示す。室温以上の範囲では、本計算で得られた線膨張係数は実験結果²²の最大2割程度大きく、また α_{33} は α_{11} よりもわずかに大きく、実験とは逆の傾向であった。これはGGAを用いた計算では、熱膨張が大きく見積もられやす

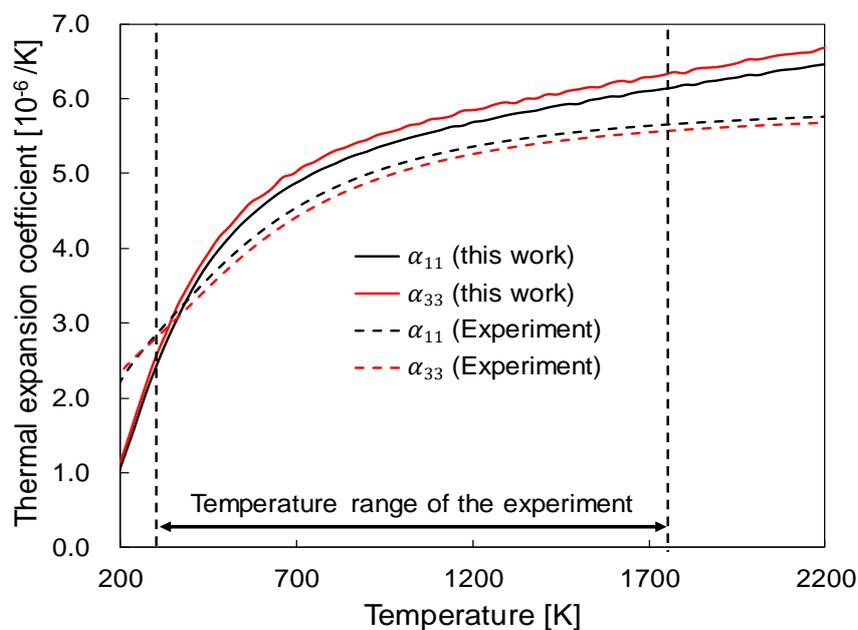


Fig. 5.7. Temperature-dependent thermal expansion coefficients obtained in this study. The experimental results²² by Stockmeier et al. are shown by dashed lines.

いという傾向¹²が影響していると考えている。1500 K, 1800 K, 2100 Kにおける格子長はそれぞれ, $a = 3.118, 3.123, 3.128 \text{ \AA}$, $ca = 3.274, 3.275, 3.275$ であった。

Fig. 5.8 に熱膨張を考慮した積層欠陥エネルギーの温度依存性を示す。1500KにおけるSSSF, DSSFの積層欠陥エネルギーは、それぞれ $12.8 \text{ mJ/m}^2, 10.5 \text{ mJ/m}^2$ であった。熱膨張を考慮する事によって、SSSF, DSSFともに高温で積層欠陥エネルギーがわずかに低下することがわかった。これは、熱膨張により原子間距離が伸びたためであると考えられる。しかしながら、熱膨張による積層欠陥エネルギーの低下は、最大でも 2 mJ/m^2 程度であった。これは、SiCは熱膨張による体積変化が小さいことに由来すると考えられる。

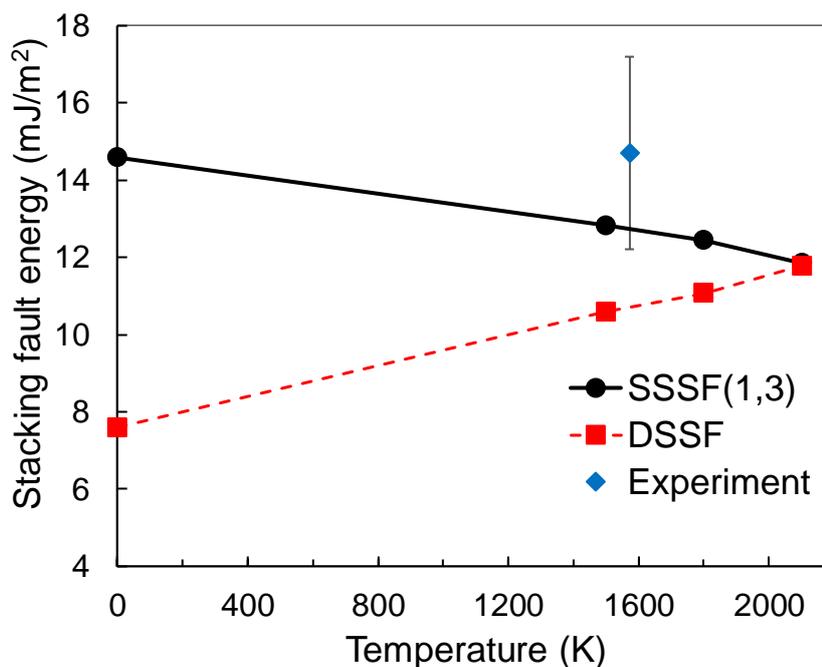


Fig. 5.8. The dependence of stacking fault energy on temperature obtained with the quasi-harmonic approximation. The experimental results of Hong et al. ⁴ are presented together with the stated uncertainties.

5.4. 得られた積層欠陥エネルギーの積層欠陥拡大/縮小への適用

5.4.1. 順方向劣化

QWA モデルを用いると、応力の影響を考慮しない場合の順方向劣化問題における積層欠陥の拡大・縮小は式(2.9)より次の式(5.6),

$$\gamma_{SF}^*(\rho, T) = -\gamma_{SF}(T) + \Delta\gamma(\rho, T), \quad (5.6)$$

の符号により判定することができる²³. ここで、 ρ , T はそれぞれ少数キャリア密度, 温度である. 5.3.1, 5.3.2 の計算結果より, 室温~300 °Cにおける SSSF の積層欠陥エネルギーは 13.8~14.8 mJ/m²であることがわかった. この結果をエネルギー利得に関する先行研究²³と比較する. Fig. 5.8 に Iijima と Kimoto による順方向劣化における QWA 効果によるエネルギー

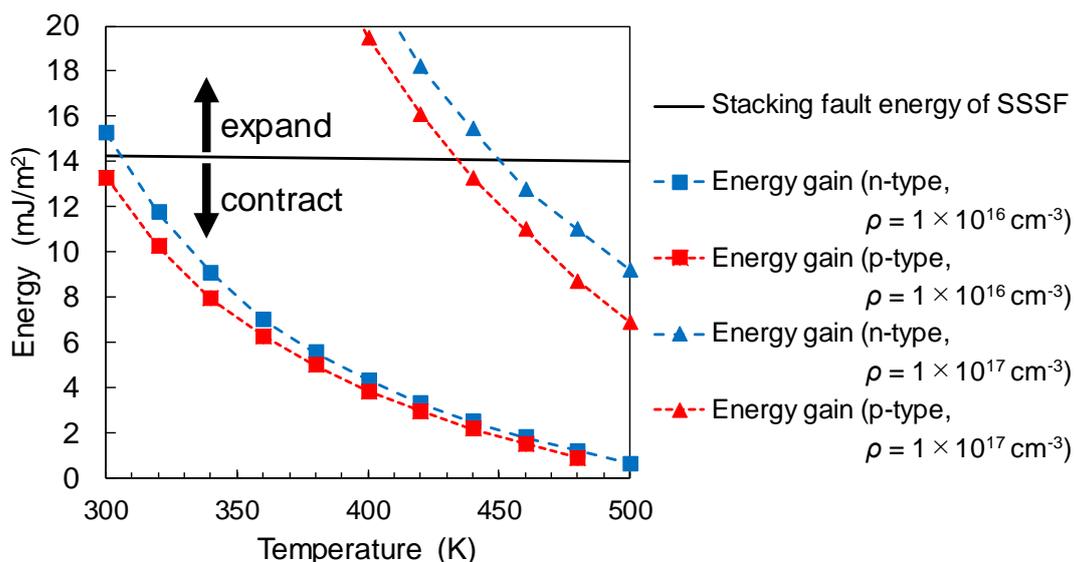


Fig. 5.9. Comparison of stacking fault energy and energy gain due to QWA effect in bipolar degradation, where ρ is the minority carrier density. Energy gain was plotted from Figure 9 in the literature³. The doping concentration was assumed to be $1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ in the calculation of energy gain.

一利得³と本計算で得られた SSSF の積層欠陥エネルギーを示す。エネルギー利得と積層欠陥エネルギーの交点における少数キャリア密度が、順方向劣化を引き起こす臨界少数キャリア密度である。Fig. 5.9 より、デバイスの動作温度の範囲内では積層欠陥が拡大する臨界少数キャリア密度はドープ密度が 10^{16} cm^{-3} と仮定した場合には $1 \times 10^{16} \sim 1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ 程度と理論的に推測することができる。同様に、Mannen らの計算結果²との比較でも臨界少数キャリア密度は約 $5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ と予測される。一方、実験では俵らにより $19 \text{ }^\circ\text{C} \sim 133 \text{ }^\circ\text{C}$ の温度範囲において臨界少数キャリア密度は $1.6 \sim 2.5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ 程度と報告²⁴されており、本研究結果と良い一致を示している。このことから、本研究で得られた積層欠陥エネルギーを用いることにより、QWA 効果を用いたエネルギーモデルから、積層欠陥の拡大・縮小の臨界条件を定量的に推測することが可能となった。

5.4.2. DSSF の自発的拡大

Fig. 5.10 に積層欠陥エネルギーと Taniguchi らにより求められた熱平衡状態における QWA によるエネルギー利得の計算結果¹の比較を示す。すべての温度範囲において DSSF の積層欠陥エネルギーはエネルギー利得を下回っているため、本計算結果では転位の移動が活発である高温では DSSF は常に拡大するという結論となり、 $1100 \text{ }^\circ\text{C}$ 以上へ加熱すると DSSF が

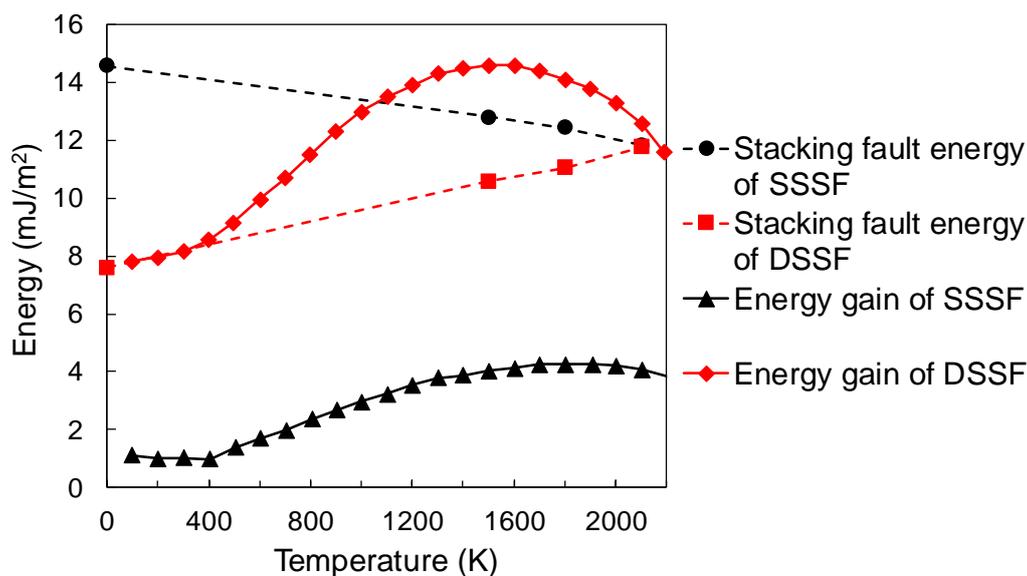


Fig. 5.10. Comparison of stacking fault energy and energy gain due to the QWA effect at thermal equilibrium. Energy gain was plotted from Figure 9 in the literature¹. In the calculation of energy gain, doping concentrations of $5.5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ and $3.5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ were assumed for the energy gains of SSSF and DSSF, respectively.

拡大し、 1800°C へ加熱すると DSSF が縮小するという現象とは合致しない。この理由には、高密度ドーパが積層欠陥エネルギーに影響を与えている可能性が考えられる。本研究で行った計算は不純物がない純 4H-SiC を仮定している。しかしながら、Umeno らの 3C-SiC に対する研究⁸では、 N が $1.0\text{-}1.4 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ ドープされている場合には積層欠陥エネルギーが最大で約 11 mJ/m^2 程度大きくなる可能性が示されている。Umeno が述べているように、ドーパントと積層欠陥の位置関係によりその変化量は小さくなるためこの値を直接用いるとはできないが、DSSF の拡大が報告されている高密度ドーパ下では 4H-SiC においても積層欠陥エネルギーが大きくなる可能性が考えられる。SSSF については全ての温度範囲においてエネルギー利得が積層欠陥エネルギーを下回っている。

また、SF エネルギーに対する高ドーピング濃度の影響に関する議論に加えて、パイポーラ劣化の場合と同様に、DSSF を境界とする部分転位のダイナミクスに関する詳細な議論が必要である。Tokuda らにより、高 N ドープした 4H-SiC を加熱したときにできる DSSF の端は同じバースペクトルを持つ 2 本の部分転位に別れている、つまり、DSSF は僅かな SSSF の領域に囲まれていることがわかっている²⁵。また、同じ温度でもドーピング密度によって、拡大する積層欠陥の形状に違いがあることが報告されている。そのため、DSSF の拡大を理解するためには、SSSF、DSSF 双方についてその境界の転位が移動するメカニズムを検討する必要がある。

5.5. 本章のまとめ

4H-SiC のシングルショックレー型積層欠陥 (SSSF), ダブルショックレー型積層欠陥 (DSSF) それぞれについて積層欠陥エネルギーの温度依存性を明らかにするため, 第一原理計算と調和振動近似および擬調和振動近似を用いてフォノンの自由エネルギーを計算した.

SSSF の積層欠陥エネルギーは室温で 14.9 mJ/m^2 程度, 1500K で 12.8 mJ/m^2 程度であり, 高温での実験結果と一致した. また, 熱膨張の影響を受け積層欠陥エネルギーが僅かに低下することがわかった. 一方で, DSSF の積層欠陥エネルギーは室温で 8 mJ/m^2 程度, 1500K で 11 mJ/m^2 程度であり温度が上がると積層欠陥エネルギーも大きくなることがわかった.

本研究で得られた計算結果を順方向劣化現象において提案されているエネルギーモデルへと適用した結果, 積層欠陥が拡大する臨界少数キャリア密度は $1 \times 10^{16} \sim 1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ 程度であると予測された. この密度は実験結果と一致しており, 本計算結果を用いることで積層欠陥の拡大/縮小についての定量的な予測が可能となった.

高 N ドープ 4H-SiC における DSSF の拡大/縮小現象についても, 先行研究で得られている QWA 効果によるエネルギー利得の計算結果に本研究で得られた積層欠陥エネルギーを適用した. 全ての温度範囲でエネルギー利得が積層欠陥エネルギーを上回り, 拡大/縮小現象と一致しない結果となった. この原因としては, 高 N ドープにより積層欠陥エネルギーが変化している可能性がある.

本章の参考文献

- ¹ C. Taniguchi, A. Ichimura, N. Ohtani, M. Katsuno, T. Fujimoto, S. Sato, H. Tsuge, and T. Yano, J. Appl. Phys. **119**, 145704 (2016).
- ² Y. Mannen, K. Shimada, K. Asada, and N. Ohtani, J. Appl. Phys. **125**, 085705 (2019).
- ³ A. Iijima and T. Kimoto, J. Appl. Phys. **126**, 105703 (2019).
- ⁴ M.H. Hong, A. V. Samant, and P. Pirouz, Philos. Mag. A **80**, 919 (2000).
- ⁵ W.J. Moon, T. Umeda, and H. Saka, Philos. Mag. Lett. **83**, 233 (2003).
- ⁶ H. Iwata, M. Kutsuna, T. Okuno, and H. Saka, Philos. Mag. Lett. **96**, 265 (2016).
- ⁷ H. Iwata, U. Lindelfelt, S. Öberg, and P.R. Briddon, Mater. Sci. Forum **389–393**, 439 (2002).
- ⁸ Y. Umeno, K. Yagi, and H. Nagasawa, Phys. Status Solidi **249**, 1229 (2012).
- ⁹ T. Thomas, D. Pandey, and U. V. Waghmare, Phys. Rev. B **77**, 121203 (2008).
- ¹⁰ M. Bhogra, U. Ramamurty, and U. V. Waghmare, J. Phys. Condens. Matter **26**, 385402 (2014).

- ¹¹ T. Ohno, T. Yamamoto, T. Kokubo, A. Azami, Y. Sakaguchi, T. Uda, T. Yamasaki, D. Fukata, and J. Koga, in *Proc. 2007 ACM/IEEE Conf. Supercomput. - SC '07* (ACM Press, New York, 2007).
- ¹² B. Grabowski, T. Hickel, and J. Neugebauer, *Phys. Rev. B* **76**, 024309 (2007).
- ¹³ P.S. Sokolov, V.A. Mukhanov, T. Chauveau, and V.L. Solozhenko, *J. Superhard Mater.* **34**, 339 (2012).
- ¹⁴ S. Limpijumng and W.R.L. Lambrecht, *Phys. Rev. B* **57**, 12017 (1998).
- ¹⁵ H. Iwata, U. Lindefelt, S. Öberg, and P.R. Briddon, *J. Appl. Phys.* **93**, 1577 (2003).
- ¹⁶ U. Lindefelt, H. Iwata, S. Öberg, and P.R. Briddon, *Phys. Rev. B* **67**, 155204 (2003).
- ¹⁷ D.W. Feldman, J.H. Parker, W.J. Choyke, and L. Patrick, *Phys. Rev.* **173**, 787 (1968).
- ¹⁸ N.H. Protik, A. Katre, L. Lindsay, J. Carrete, N. Mingo, and D. Broido, *Mater. Today Phys.* **1**, 31 (2017).
- ¹⁹ J.Q. Liu, H.J. Chung, T. Kuhr, Q. Li, and M. Skowronski, *Appl. Phys. Lett.* **80**, 2111 (2002).
- ²⁰ R.S. Okojie, M. Xhang, P. Pirouz, S. Tumakha, G. Jessen, and L.J. Brillson, *Appl. Phys. Lett.* **79**, 3056 (2001).
- ²¹ T.L. Straubinger, R.L. Woodin, T. Witt, J. Shovlin, G.M. Dolny, P. Sasahara, E. Schmitt, A.D. Weber, J.B. Casady, and J.R.B. Casady, *Mater. Sci. Forum* **645–648**, 223 (2010).
- ²² M. Stockmeier, R. Müller, S.A. Sakwe, P.J. Wellmann, and A. Magerl, *J. Appl. Phys.* **105**, 033511 (2009).
- ²³ K. Maeda, in *Mater. Reliab. Handb. Semicond. Opt. Electron Devices*, edited by O. Ueda and S.J. Pearton (Springer, New York, 2013), pp. 263–281.
- ²⁴ T. Tawara, S. Matsunaga, T. Fujimoto, M. Ryo, M. Miyazato, T. Miyazawa, K. Takenaka, M. Miyajima, A. Otsuki, Y. Yonezawa, T. Kato, H. Okumura, T. Kimoto, and H. Tsuchida, *J. Appl. Phys.* **123**, 025707 (2018).
- ²⁵ Y. Tokuda, T. Yamashita, I. Kamata, T. Naijo, T. Miyazawa, S. Hayashi, N. Hoshino, T. Kato, H. Okumura, T. Kimoto, and H. Tsuchida, *J. Appl. Phys.* **122**, 045707 (2017).

第6章 順方向劣化現象における臨界少数キャリア密度の応力依存性

6.1. 緒言

第2章で述べたように、順方向劣化現象における積層欠陥の拡大は転位論に QWA モデルによる積層欠陥エネルギーの低下を導入することより解釈可能であると考えられる。第5章では、積層欠陥エネルギーの温度依存性を求め、QWA モデルに基づいた積層欠陥拡大の判定について温度の影響の高精度化を行った。しかしながら、これまでの研究は積層欠陥エネルギーの低下に関する理論研究や転位の観察実験が中心であるため、応力と QWA モデルによる電氣的なエネルギー利得の両者を統合した検討はまだ行われていない。第6章では、共同研究で行った積層欠陥拡大の閾値電流密度の外部応力による変化に関する実験結果を基に、部分転位に働く分解せん断応力が積層欠陥拡大の臨界少数キャリア密度に与える影響を明らかにする。まず、6.2 で臨界少数キャリア密度の応力依存性の理論モデルについて説明し、続いて 6.3 で実験と解析の概要について説明する。次に、転位に働く分解せん断を明らかにするために行った FEM 解析、および電流密度から少数キャリア密度を求めるために構築したデバイスシミュレーションについてそれぞれ 6.4, 6.5 で説明する。最後に、6.6 でそれぞれの解析の妥当性の確認を行い、分解せん断応力と積層欠陥拡大の臨界少数キャリア密度の関係について議論する。

6.2. 臨界少数キャリア密度の応力依存性の理論モデル

分解せん断応力と臨界少数キャリア密度の関係について考える。第2章での議論より、転位論に基づく積層欠陥エネルギーと外部応力の関係は以下の式(6.1)で示される。

$$\tau_{\text{drv}}^*(\rho, T, \tau_{\text{ext}}^{\text{RSS}}) = \tau_{\text{ext}}^{\text{RSS}} - \frac{\gamma_{\text{SF}}(T) - \Delta\gamma(\rho, T)}{b}. \quad (6.1)$$

ただし、 ρ , T はそれぞれ少数キャリア密度、温度である。第5章より室温付近では $\gamma(T)$ は温度変化の影響を殆ど受けないことがわかった。一方で、また、エネルギー利得 $\Delta\gamma$ の温度依存性については Iijima らの結果³⁴によると、100 °C 付近では少数キャリア密度 ρ が 1.0×10^{17}

cm⁻³ の場合 0.4 mJ/°C程度である。ここで、応力負荷による電流密度の変化に伴う温度変化（数°C程度）によるエネルギー利得の変化は無視できると仮定すると、式(6.1)は温度に依存しない関係式として以下の式(6.2)で表される。

$$\tau_{\text{drv}}^*(\rho, \tau_{\text{ext}}^{\text{RSS}}) = \tau_{\text{ext}}^{\text{RSS}} + \frac{\Delta\gamma(\rho)}{b} - \frac{1}{b}\gamma_{\text{SF}}. \quad (6.2)$$

積層欠陥が拡大を始める応力と臨界少数キャリア密度では、 $\tau^*(\rho, \tau_{\text{ext}}^{\text{RSS}}) = 0$ が常に成立する。この関係を満たす臨界少数キャリア密度を ρ_{th} と表すと、外部応力による臨界少数キャリア密度の変化は以下の式(6.3)で表現できる。

$$b\tau_{\text{ext}} + \Delta\gamma(\rho = \rho_{\text{th}}) = b\gamma. \quad (6.3)$$

また、 $\rho = \rho_{\text{th}}$ の周りで式(6.3)を τ_{ext} で微分することにより $\partial\rho/\partial\tau_{\text{ext}}$ は次の式(6.4)で表すことができる。

$$\left. \frac{\partial\rho}{\partial\tau_{\text{ext}}} \right|_{\rho=\rho_{\text{th}}} = - \frac{b}{\left. \frac{\partial\Delta\gamma}{\partial\rho} \right|_{\rho=\rho_{\text{th}}}}. \quad (6.4)$$

式(6.4)は $\tau_{\text{drv}}^*(\rho, \tau_{\text{ext}}^{\text{RSS}}) = 0$ を満たす少数キャリア密度、すなわち臨界少数キャリア密度 ρ_{th} の応力による変動 $\partial\rho_{\text{th}}/\partial\tau_{\text{ext}}^{\text{RSS}}$ を表している。以下では、式(6.4)から得られる ρ_{th} と $\tau_{\text{ext}}^{\text{RSS}}$ の定量的な関係について考える。まず、幾何学的な関係より、結晶の格子定数 $a = 3.07 \text{ \AA}$ ³⁵を用いて、部分転位のバーガスベクトルの大きさは $b = 0.177 \text{ nm}$ と求めることができる。一方で、エネルギー利得 $\Delta\gamma$ の少数キャリア密度依存性については、Iijima と Kimoto による室温での計算結果³⁴を参考にドーピング密度 $N_{\text{d}} = 1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ の場合について、 $\Delta\gamma = 3.88 \times 10^{-6} \rho^{0.43}$ を仮定する。このとき、式(6.4)に対して、 b と $\Delta\gamma$ を代入することにより、臨界少数キャリア密度 ρ_{th} が $1.0 \times 10^{16} \sim 1.0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ の範囲内である場合、 $\partial\rho_{\text{th}}/\partial\tau_{\text{ext}}^{\text{RSS}}$ は、 $(-0.03 \pm 0.02) \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}/\text{MPa}$ 程度と予測することができる。 $N_{\text{d}} = 1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ の場合にも同様の値が得られたことから、 $\partial\rho_{\text{th}}/\partial\tau_{\text{ext}}^{\text{RSS}}$ はドーピング密度 N_{d} への依存性は小さいと推定される。

6.3. 実験²と解析の概要

先行研究となる Goryu らの実験²では、四点曲げによりデバイスに一軸の荷重をかけ、積層欠陥が拡大する閾値電流密度の応力による変動を測定した。試験片を Fig. 6.1 に示す。試験片は pin ダイオードのカソード電極とリン青銅板を Au-12%Ge（融点 356°C）を用いて接合することにより作成されている。pin ダイオードの接合方向は、Fig. 6.1 に示すように pin ダイオード中の帯状欠陥のすべり方向（ $\pm[1\bar{1}00]$ ）が 4 点曲げにより付加される荷重方向と $\pm 45^\circ$ を成すように接合されているもの（斜め配置）と、すべり方向と荷重方向が 0° もしくは 90° を成すように接合されているもの（垂直配置）の合計 4 種類がある。Fig. 6.2.に 4 点曲げ

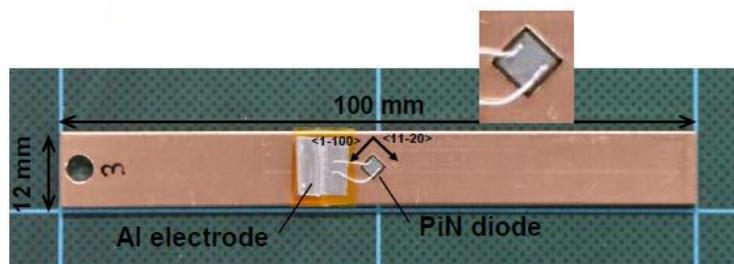


Fig. 6.1. Specimen used in stress load test.

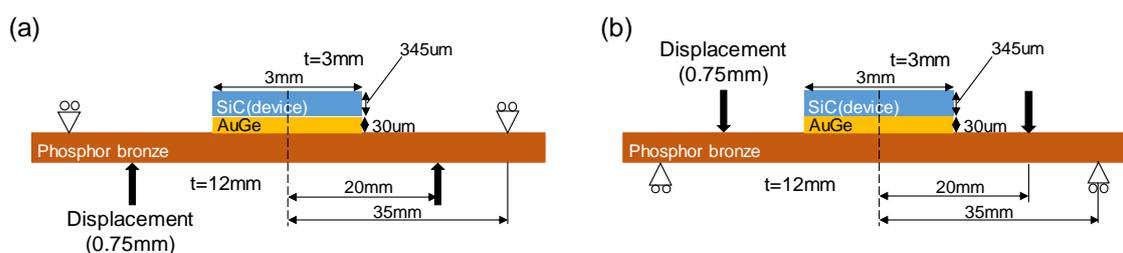


Fig. 6.2. Schematic diagram of 4-point bending. The stress applied to each device is (a) tensile stress and (b) compressive stress. Since the SiC device and the bonding material (AuGe) are shown large, the actual scale is different from the figure.

の模式図を示す。実験手順は次の通りである。まず、外部応力を負荷せずに通電試験を行い、積層欠陥が拡大する閾値電流密度を測定する。発熱を抑制するため、電流は周波数 2.5 Hz, duty 比 50 %の矩形波で与えた。第 2 に、300 °C以上へと加熱し微弱な電流を流すことにより積層欠陥を縮小させる。第 3 に、4 点曲げを行い、デバイスに一軸の引張/圧縮応力を加え、通電試験により積層欠陥拡大の閾値電流密度を測定する。最後に、再び 300 °C以上へと加熱し、積層欠陥を縮小させる。積層欠陥の拡大起点それぞれについて以上の手順を繰り返すことにより、負荷した外部荷重と拡大閾値電流密度変化の関係が得られる。12 個の帯状欠陥について測定を行った。

先行研究²では、FEM 解析を用いて 4 点曲げ時の分解せん断応力を求めることにより、分解せん断応力と拡大閾値電流密度の関係を明らかにしている。しかしながら、行われた FEM 解析では SiC デバイス構造が簡易化されており、電極の残留応力が与える影響については検討が行われていない。これは、試験片とデバイスの詳細構造の間に大きなスケールの隔たりがあるためである。そのため、本研究では電極の残留応力がエピ/サブ界面の分解せん断応力に与える影響についての検討を行う。実験系を再現するモデルにおいて SiC デバイスの微細構造まで再現した解析を行うことは計算負荷の観点から困難であるため、積層欠陥拡大起点の周囲のみ詳細に解析を行うサブモデリング解析を行うことで、電極の残留

応力と外部荷重の両者の影響を考慮した分解せん断応力を明らかにする。また、積層欠陥の拡大/縮小に関する理論モデルは、実験により測定される電流密度ではなく実際の電荷輸送を担う少数キャリアの密度を用いてモデル化されている。そのため、実験結果を理論的に考察するためには、実験で得られた拡大閾値電流密度を臨界少数キャリアへと変換する必要がある。pin ダイオード中のキャリア密度分布を解析的に求めることは困難であるため、本研究では TCAD デバイスシミュレータを用いてエピ/サブ界面の少数キャリア密度を求める。最後に解析で得られた分解せん断応力と臨界少数キャリア密度の関係について、理論モデルとの比較を通じて考察する。

6.4. FEM 解析

6.4.1. サブモデリング解析の概要

6.3 で示した実験の概要に従い FEM 解析により 4 点曲げでデバイス内の積層欠陥拡大起点に生じる分解せん断応力を求める。実験系とデバイス構造の間には非常に大きなスケール差があるため、積層欠陥拡大起点の周囲のみ詳細に解析を行うサブモデリング解析を行うことで、電極の残留応力と外部荷重の両者の影響を考慮した分解せん断応力を明らかにする。Fig. 6.3 に本研究で構築したサブモデリング解析の概略を示す。解析手順は次のとおりである。まず、Fig. 6.2 に従って作成した全体解析モデルを用いて SiC 基板の変位分布を求める。本モデルでは SiC デバイスの構造は再現せず平板として扱う。SiC の平面方向のメッシュサイズは $100\ \mu\text{m}$ 角程度である。次に、積層欠陥拡大起点の周囲をより詳細に解析するため、全体解析で求めた変位分布を境界条件に用いた中間解析モデルによる解析を行う。本モデルでは表面電極の大まかな構造のみを考慮した解析を行う。モデルサイズは $200\ \mu\text{m}$ 角、電極付近の SiC のメッシュサイズは $3\sim 8\ \mu\text{m}$ である。最後に、中間解析で得られた変

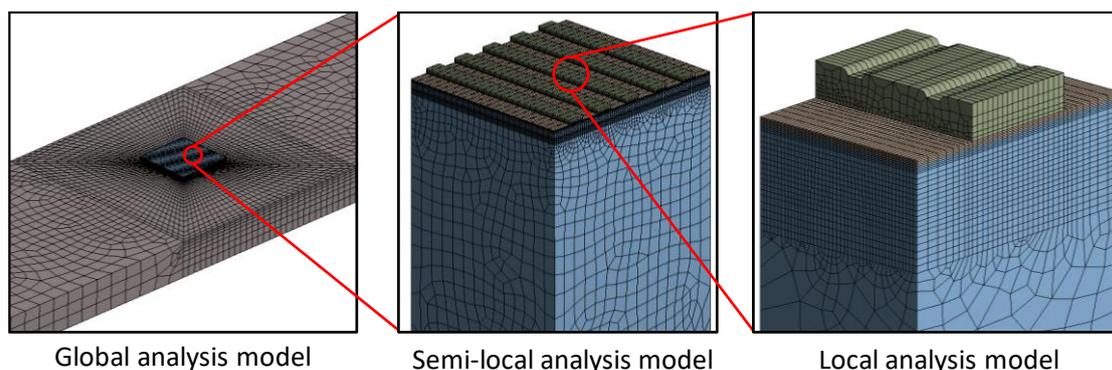


Fig. 6.3. Schematic of submodeling analysis.

Table 6.1. Analysis steps considered in each analysis models. Steps 1 to 5 correspond to the device making process, and steps 6 to 8 correspond to the four-point bending experiment.

	Process (formed films)	Temp. (°C)	Global analysis	Semi-local analysis	Local analysis
1	Epitaxy (drift layer)	(R. T.)		○	○
2	Ion implantation (p ⁺ layer)	(R. T.)		○	○
3	CVD (SiO ₂)	800		○ (simplified)	○
4	Sputtering (Nickel Silicide)	975			○
5	Sputtering (Al layer)	250		○ (simplified)	○
6	Die-Attach	360	○	○	○
7	4-point bending	R. T.	○	○	○
8	temperature elevation due to current	50 - 120	○	○	○

位分布を境界条件に用いて詳細解析モデルによる解析を行う。詳細モデルでは SiC デバイスの詳細構造を再現した解析を行い、積層欠陥拡大起点の分解せん断応力を求める。SiC デバイスの構造は第 4 章と同じであるが、サブモデリング解析では境界の構造を大きなスケールの解析と一致させる必要があるため、モデルサイズは $28\ \mu\text{m} \times 40\ \mu\text{m}$ と第 4 章で使用したものよりも拡大している。電極付近の SiC のメッシュサイズは $0.5 \sim 1\ \mu\text{m}$ である。

以上の手順を積層欠陥拡大起点それぞれに対して行うことにより、拡大起点の分解せん断応力をデバイスの構造が与える影響まで含めて明らかにすることが可能となる。それぞれの解析モデルで考慮する解析ステップを Table 6.1 に示す。それぞれの解析の詳細について以下に示す。

6.4.2. 全体解析モデル

全体解析では SiC チップと Cu プレーットの接合により生じる熱応力、および四点曲げにより生じる応力を求めるため、Table 6.1 に示したように 3 ステップからなる多段階熱応力解析を行った。まず、第 1 ステップでは AuGe の融点付近である温度 $360\ ^\circ\text{C}$ において、SiC デバイス、AuGe、Cu プレーットの接合を行う。次に、第 2 ステップでは、室温で四点曲げによる引張/圧縮を行う。モデルについては Fig. 6.2 に従い中心から $20\ \text{mm}$ の位置で Cu プレー트에強制変位 ($0.75\ \text{mm}$) を加える。最後に、第 3 ステップで、温度をデバイス動作温度である $50 \sim 120\ ^\circ\text{C}$ の範囲で $10\ ^\circ\text{C}$ 刻みで温度を変化させ、それぞれの温度における応力分布を求める。解析モデルのメッシュを Fig. 6.4 に示す。実験での配置に合わせ、SiC デバイスを Cu 板と接合する向きにより (b) 垂直配置と (c) 斜め配置の 2 種類の形状モデルを作成した。

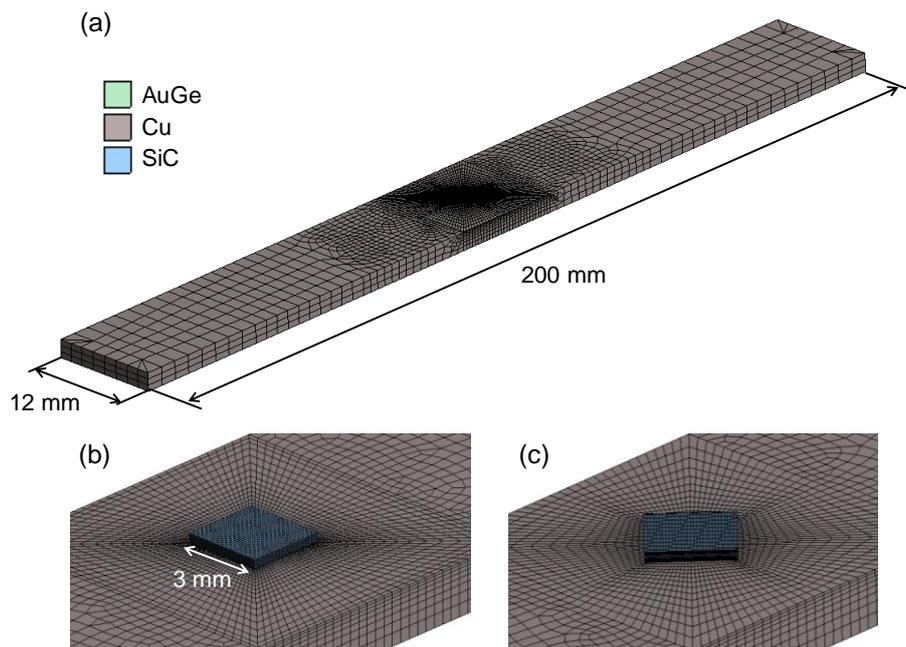


Fig. 6.4. (a) Overall view and (b), (c) enlarged view of mesh used in global analysis model. AuGe, which is too thin to be seen in this figure, is sandwiched between SiC and Cu plates. Regarding the orientation of SiC devices, a total of four types of analysis consisting of two types of bonding directions and two types of crystal directions were analyzed.

Table 6.2. Material properties used in global analysis model.

	Elastic constant and Poisson's ratio ν	Linear expansion coefficient	Yield stress
AuGe ^{23,24}	72 GPa (at 22 °C)	13×10^{-6} [1/K]	165 MPa (at 22 °C)
	65 GPa (at 170 °C)		148 MPa (at 170 °C)
	32 GPa (at 320 °C)		58 MPa (at 320 °C)
	$\nu = 0.32$		
Phosphor bronze ²⁵	105 GPa, $\nu = 0.33$	18×10^{-6} [1/K]	

さらに、それぞれのモデルについて SiC 基板の 4° オフ $[11\bar{2}0]$ 方向の向きが 90° 異なる 2 種類の結晶方位の異方性が存在するため、解析モデルは全部で $2 \times 2 = 4$ パターンである。要素数は 43,375 要素、接点数は 185,237 要素で、SiC のメッシュサイズは約 $100 \mu\text{m}$ 角である。FEM

解析で用いた材料物性値を Table 6.2 に示す. 接合剤である AuGe は温度依存の弾塑性材料として設定した.

6.4.3. 中間解析モデル

全体解析モデルとデバイスの詳細構造の間には大きなスケールの隔たりがあるため, サブモデリング解析を用いても両者を直接結びつけることは難しい. そこでよりスムーズに解析を進めるため, デバイスの構造を簡易的に再現した中間解析モデルを間に挟む. Fig. 6.5 に中間解析の解析モデルを示す. 本モデルのサイズは $200\ \mu\text{m} \times 200\ \mu\text{m} \times 345\ \mu\text{m}$ で, 47,667 要素, 192,546 節点で構成されている. 電極構造を簡易的に再現するため, SiC 基板上に厚さ $0.9\ \mu\text{m}$ の SiO_2 膜とその上に line-and-space パターンを持つ Al 電極を作成している. 電極の構造, 材料特性は第4章と同様で, 電極付近の SiC のメッシュサイズは $3\sim 8\ \mu\text{m}$ である. 解析は2段階から成る. まず, 第一段階では第4章に従い SiC 上に SiO_2 膜と Al 膜をそれぞれの温度条件で積層する. この時点では解析モデルは周期境界条件である. その後, 第二段階では全体解析モデルで得られた変位場を変位境界条件として用い, 全体解析モデルと同様に $360\ ^\circ\text{C}$ への昇温, 室温での変形を行い, $50\sim 120\ ^\circ\text{C}$ の温度範囲での応力分布を $10\ ^\circ\text{C}$ 刻みでそれぞれ求める.

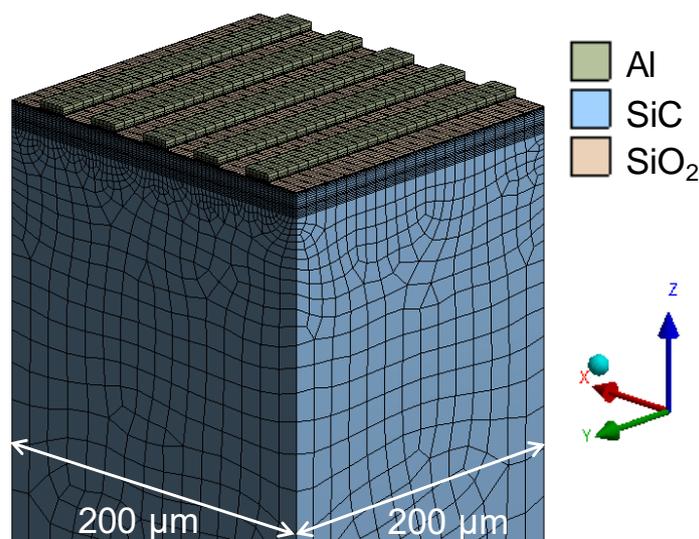


Fig. 6.5. FE model of semi-local analysis model. The structure of the electrode having line-and-space pattern is simplified. The $[11\bar{2}0]$ direction of SiC is the direction in which the y axis is rotated 4° around the x axis.

6.4.4. 詳細解析モデル

詳細モデルを Fig. 6.6 に示す。SiC デバイスの構造や使用している材料特性は第4章と同一であるが、サブモデリング解析ではスケールの異なる解析間での解析モデルの形状の違い等に起因して不自然な応力分布が境界部に生じやすいため、モデルサイズを応力解析の章で使用した $7\ \mu\text{m} \times 10\ \mu\text{m}$ から $28\ \mu\text{m} \times 40\ \mu\text{m}$ へと拡大している。電極付近の SiC のメッシュサイズは $0.5 \sim 1\ \mu\text{m}$ である。詳細モデル解析では、まず第4章と同様の条件でデバイスの残留応力解析を行う。次に、中間解析モデルで得られた変位場を変位境界条件として用い、実験に対応した $360\ \text{°C}$ への昇温、室温での変形を行い $50 \sim 120\ \text{°C}$ の温度範囲での応力分布を $10\ \text{°C}$ 刻みでそれぞれ求める。最終的に得られたデバイス動作時の応力場を用いて、積層欠陥拡大起点の分解せん断応力を明らかにする。

それぞれの積層欠陥が拡大を開始する時の温度 T (°C) は、実験において熱電対を用いて測定された結果より電流密度 I (A/cm^2) を用いて式(6.5),

$$T = 0.13I + 27.5, \quad (6.5)$$

により決定した。温度範囲は $70 \sim 120\ \text{°C}$ 程度である。積層欠陥拡大開始時の分解せん断応力は、式(6.5)で与えられる動作温度 T を用いて、 $10\ \text{°C}$ 刻みで行った FEM 解析の結果を線形補完することにより求めた。

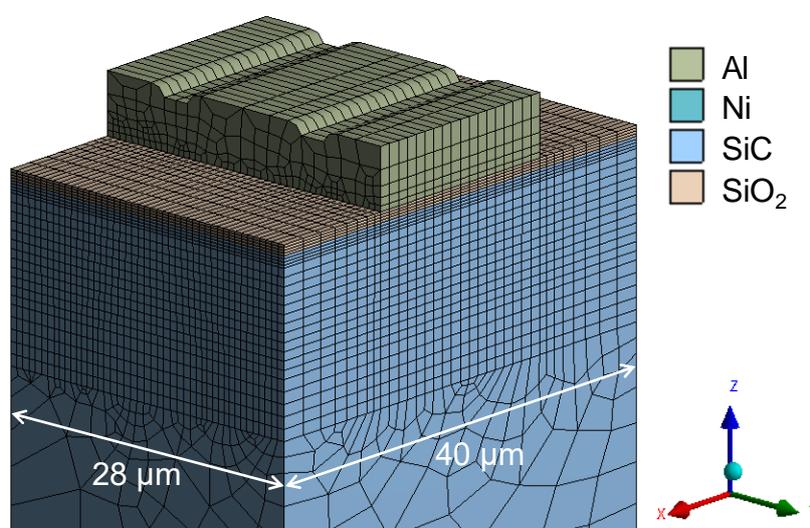


Fig. 6.6. FE model of local analysis model. Though the device structure is the same as in Chapter 4, the model structure has been enlarged to support submodeling analysis.

6.5. デバイスシミュレーション

6.5.1. 4H-SiC に対応したシミュレータの構築

本研究では、デバイスシミュレータとして Selete, STARC および TRDEC で開発された 3 次元 TCAD シミュレータ HyENEXSS^{3,4} を用いる。4H-SiC に対応したシミュレーションを行うため、ドーパントの濃度と自由キャリア密度の関係、キャリアの移動度、キャリア寿命、およびバンドギャップについて以下の物理モデルを導入した。その他の基礎パラメータの一覧を Table 6.3 に示す。

① ドーパント濃度と自由キャリア密度の関係

SiC はイオン化エネルギーが高いため、シリコンのようにドーピングで注入した不純物が全て活性化し電子や正孔を供給するわけではない。そのため、ドーピング濃度 N_D , N_A とは別に、自由キャリアを供給するドーパントの数を示すイオン化ドーピング濃度 N_D^+ , N_A^- を考える必要がある。熱平衡状態におけるドーパントのイオン化率は、フェルミディラック統計からそれぞれ以下の式(6.6), (6.7)で表すことができる⁵⁻¹⁰。

$$\frac{N_D^+}{N_D} = \frac{-1 + \sqrt{1 + 4g_c \frac{N_D}{N_c(T)} \exp\left(\frac{E_D}{kT}\right)}}{2g_c \frac{N_D}{N_c(T)} \exp\left(\frac{E_D}{kT}\right)}, \quad (6.6)$$

$$\frac{N_A^-}{N_A} = \frac{-1 + \sqrt{1 + 4g_v \frac{N_A}{N_v(T)} \exp\left(\frac{E_A}{kT}\right)}}{2g_v \frac{N_A}{N_v(T)} \exp\left(\frac{E_A}{kT}\right)}. \quad (6.7)$$

ここで k , T はそれぞれボルツマン定数と温度, $g_c = 2$, $g_v = 4$ は伝導帯, 価電子帯の縮退数, E_D, E_A はドナー, アクセプタのイオン化エネルギーである。また, $N_c(T)$, $N_v(T)$ はそれぞれ伝導帯, 価電子帯の温度依存の有効状態密度で, それぞれ

Table 6.3. Basic parameters of SiC used in device simulations.

parameters	value
density ²⁶	$3.21 \times 10^{-3} \text{ kg/cm}^3$
dielectric constant ¹³	10.03
bandgap (at 0 K) ¹³	3.285 eV
electron affinity ²⁷	3.2 eV
Effective DOS at conduction band N_{c,T_0} (at 300 K) ²⁸	$1.8 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$
Effective DOS at valence band N_{v,T_0} (at 300 K) ²⁸	$2.1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$

$$N_c(T) = N_{c,T_0} \left(\frac{T}{300} \right)^{3/2}, \quad (6.8)$$

$$N_v(T) = N_{v,T_0} \left(\frac{T}{300} \right)^{3/2}, \quad (6.9)$$

で与えられる. n型, p型のドーパントにそれぞれ N , AI を用いた場合, イオン化エネルギーはそれぞれ $E_D = 70, E_A = 190$ meV程度⁶であるが, ドーピング濃度が高い場合にはイオン化エネルギーが低下することが知られている^{11,12}. 本研究ではドーピング濃度依存性を考慮したイオン化エネルギー E_D, E_A をそれぞれ式(6.10)¹³ と式(6.11)¹² で与える.

$$E_D = E_{0,D} - \alpha_D N_{\text{dop}}^{1/3}, \quad (6.10)$$

$$E_A = \frac{E_{0,A}}{1 + \left(\frac{N_{\text{dop}}}{N_E} \right)^a}. \quad (6.11)$$

但し, $E_{0,D} = 0.105$ eV, $\alpha_D = 4.26 \times 10^{-8}$ eV cm, $E_{0,A} = 0.21486$ eV, $a = 8.12 \times 10^{19}$ cm⁻³, $a = 0.632$ である.

これらのパラメータを用いて式(6.6) ~ 式(6.11)により得られる N_D^+ , N_A^- には, 格子欠陥等の影響は考慮されていない. しかしながら, イオンインプランテーションを用いて作成された結晶については, その後のアニーリングプロセスによっては十分に自由キャリアが供給されない場合があることが指摘されている. Watanabe らにより, イオンインプランテーションにより作成した p 層は, 1700 °C で 10 分間アニーリングするのみでは, エピタキシャル成長によって作成した p 層に比べホール密度が低くなることが報告されている¹⁴. そのため本研究では p 層については, 正孔を供給するアクセプタ密度を式(6.7), (6.9), (6.11)から得られる値の 1/10 倍と設定した.

② 移動度

電子や正孔は電界により移動するが, 個々の粒子はその途中でフォノンや不純物, 結晶欠陥等による散乱を受けるため, その運動はランダムウォークを含むものとなる. そこで, 電子, 正孔それぞれの集団としての平均的な移動速度が移動度として定義される. 本研究では, SiC デバイス中の移動度には不純物濃度と温度を考慮した Arora モデルを用いる. Arora モデルではキャリアの移動度 μ は次の式(6.12),

$$\mu(N_{\text{dop}}, T) = A_{\text{min}} \left(\frac{T}{300} \right)^{\alpha_m} + \frac{A_d \left(\frac{T}{300} \right)^{\alpha_d} - A_{\text{min}} \left(\frac{T}{300} \right)^{\alpha_m}}{1 + \left(\frac{N_{\text{dop}}}{A_N \left(\frac{T}{300} \right)^{\alpha_N}} \right)^{A_a \left(\frac{T}{300} \right)^{\alpha_a}}}, \quad (6.12)$$

で与えられる. ただし, N_{dop} はドナー, アクセプタそれぞれの不純物濃度 N_D, N_A の合計で

ある。それぞれの係数を Table 6.4 に示す。係数の値には Hatakeyama¹³ らの結果を用いた。但し、文献で用いられているパラメータは c 軸に垂直な方向のキャリア移動であるため、 c 軸に沿った方向にキャリアが移動する本解析では結晶方位の異方性による移動度の変化を考慮する必要がある。そのため、 A_{\min} と A_d を文献の値から電子については 1.2 倍、正孔については 0.87 倍に変更している^{13,15}。

③ キャリア寿命

半導体では、価電子帯の電子や伝導帯の正孔が活性化されて生じる伝導帯の自由電子や価電子帯の正孔が少数キャリアとして働く。これらのキャリアは高いエネルギー準位にあるため、ある時間の後に再結合により消滅する。この少数キャリアの生成から再結合までの時間を（少数）キャリア寿命と呼ぶ。本研究では、キャリア散乱のモデルとして Shockley-Read-Hall モデル (SRH) モデルと Auger 再結合モデルを用いる。キャリア寿命 τ はそれぞれの散乱機構によるキャリア寿命 τ^{SRH} 、 τ^{Auger} を用いて以下の式(6.13)。

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau^{\text{SRH}}} + \frac{1}{\tau^{\text{Auger}}}, \quad (6.13)$$

によって求められる。

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に対応する。一般的に、SRH モデルのキャリア寿命の不純物依存性は

$$\tau^{\text{SRH}}(N) = \frac{\tau_0}{1 + \left(\frac{N}{N_{\text{ref}}}\right)^B}, \quad (6.14)$$

Table 6.4. Parameters used in mobility formula (6.8)¹³

Symbol	electron	hole
A_{\min}	6 cm ² /Vs	0 cm ² /Vs
α_m	-0.57	-0.57
A_d	1212 cm ² /Vs	98 cm ² /Vs
α_d	-2.6	-2.6
A_N	1.25×10 ¹⁷ cm ⁻³	2.4×10 ¹⁸ cm ⁻³
α_N	2.4	2.9
A_a	0.65	0.69
α_a	-0.146	-0.2

と表される。ただし、4H-SiC では $B = 0.9$, $N_{\text{ref}} = 3 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$ である⁵。 τ_0 は結晶欠陥の密度などにより変化するため、デバイスやプロセスに依存するフィッティングパラメータとなる。本解析では、Tawara らが窓あき電極付き pin ダイオードについてドリフト層における正孔のキャリア寿命を測定した結果¹⁶を用いてフィッティングを行う。4H-SiC ではキャリアライフタイムの温度依存性は

$$\tau^{\text{SRH}}(T) = \tau_0 \exp\left(\frac{-0.105}{kT}\right), \quad (6.15)$$

と表されることがわかっている¹⁷。式(6.14), (6.15)を用いて Tawara らの測定結果に対してフィッティングを行うと、 τ_p は次の式(6.16)で表すことができる。

$$\tau_p^{\text{SRH}}(T, N) = \frac{2.49 \times 10^{-5} \times \exp\left(\frac{-0.105}{kT}\right)}{1 + \left(\frac{N}{3 \times 10^{17}}\right)^{0.3}}. \quad (6.16)$$

また、 τ_n については Si において一般的に用いられる $\tau_n = 5\tau_p$ の関係⁵を用いた。キャリア寿命は結晶欠陥の密度などに強く影響を受けるため、ウェハや p 層のキャリア寿命についてはこれらの値を直接適用することは適当ではない。本研究では、式(6.16)を基準に τ_0 を定数倍することにより決定した。係数はホール密度の分布を先行研究の結果¹⁶と比較することにより決定し、p 層はドリフト層の 2×10^{-5} 倍、ウェハはドリフト層の 2×10^{-3} 倍とした。このキャリア寿命の設定の妥当性の確認は、6.5.2 で行う。また、Tawara の先行研究では p+層がエピタキシャル成長により作成されているのに対し、本研究で使用したデバイスはインプラで作成されている。Al インプラでは結晶欠陥が生じキャリア寿命が低下することから、6.4.2 で示すデバイスシミュレーションでは、p 層のキャリア寿命は合わせ込みの結果の 1/2 倍、すなわちドリフト層の 1×10^{-5} 倍と設定した。

Auger 再結合モデルは、電子と正孔が再結合することで生じたエネルギーが他の電子や正孔に与えられることにより高エネルギーの電子、正孔が生じる現象を再現するモデル¹⁸である。Auger 再結合モデルによる電子と正孔のキャリア寿命 τ_n^{Auger} , τ_p^{Auger} は、電子と正孔の密度 n , p を用いてそれぞれ以下の式で与えられる。

$$\frac{1}{\tau_n^{\text{Auger}}} = C_i n^2, \quad (6.17)$$

$$\frac{1}{\tau_p^{\text{Auger}}} = C_i p^2. \quad (6.18)$$

ただし、 $C_n = 5.0 \times 10^{-31}$, $C_p = 2.0 \times 10^{-31}$ (cm⁶/s) である^{9,19}。

④ バンドギャップの変化

バンドギャップ E_g の変化として、本研究では温度依存性 E_g^{in} と不純物濃度依存性 ΔE_g^{dop} を考慮し、

$$E_g = E_g^{\text{in}} - \Delta E_g^{\text{dop}}, \quad (6.19)$$

と定義する．温度依存性を考慮したバンドギャップは次の式(6.20),

$$E_g^{\text{in}} = 3.285 - 9.06 \times 10^{-4} \cdot \frac{T^2}{(T + 2030)} \text{ (eV)}, \quad (6.20)$$

で与えられる¹³．また，不純物濃度依存性には Lindefelt により測定された以下の式(6.21)~式(6.25)を用いる²⁰．

$$\Delta E_g^{\text{dop}} = \Delta E_c + \Delta E_v. \quad (6.21)$$

$\Delta E_c, \Delta E_v$ はそれぞれ不純物による伝導帯端，価電子帯端のエネルギー準位の変化量を表す．但し， $\Delta E_c, \Delta E_v$ 共にバンドギャップが狭くなる方向を正とする．n 型 SiC の場合には， $\Delta E_c, \Delta E_v$ はイオン化ドナー密度 N_D^+ の関数としてそれぞれ式(6.22)，(6.23)で与えられる．

$$\Delta E_c = A_{nc} \left(\frac{N_D^+}{10^{18}} \right)^{1/3} + B_{nc} \left(\frac{N_D^+}{10^{18}} \right)^{1/2}, \quad (6.22)$$

$$\Delta E_v = A_{nv} \left(\frac{N_D^+}{10^{18}} \right)^{1/4} + B_{nv} \left(\frac{N_D^+}{10^{18}} \right)^{1/2}. \quad (6.23)$$

一方，p 型 SiC の場合には， $\Delta E_c, \Delta E_v$ はイオン化アクセプタ密度 N_A^- の関数としてそれぞれ式(6.24)，(6.25)で与えられる．

$$\Delta E_c = A_{pc} \left(\frac{N_A^-}{10^{18}} \right)^{1/4} + B_{pc} \left(\frac{N_A^-}{10^{18}} \right)^{1/2}, \quad (6.24)$$

$$\Delta E_v = A_{pv} \left(\frac{N_A^-}{10^{18}} \right)^{1/3} + B_{pv} \left(\frac{N_A^-}{10^{18}} \right)^{1/2}. \quad (6.25)$$

4H-SiC では， $A_{nc} = 1.50 \times 10^{-2}$ ， $B_{nc} = 2.93 \times 10^{-3}$ ， $A_{nv} = 1.90 \times 10^{-2}$ ， $B_{nv} = 8.74 \times 10^{-3}$ ， $A_{pc} = 1.57 \times 10^{-2}$ ， $B_{pc} = 3.87 \times 10^{-4}$ ， $A_{pv} = 1.30 \times 10^{-2}$ ， $B_{pv} = 1.15 \times 10^{-3}$ (eV) である．

6.5.2. 解析条件

Fig. 6.7 にデバイスシミュレーションに用いた pin ダイオードの構造の模式図を示す．N 濃度 $5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ の n^+ 基板の上に，N 濃度 $1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ の n^- ドリフト層をエピタキシャル成長層により作成し，表面には Al 濃度 $3 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ の p^+ 層がイオンインプランテーションにより作成されている．詳細なデバイス作成方法は第4章で示した通りである．デバイスシミュレーションでは，実際のデバイスには存在しない厚さ 200 nm の中間層を n^+ 層とドリフト層の間に設定した．これは，エピサブ界面近傍のドーパ密度が n^+ 層とドリフト層の中間程度になっている領域を擬似的に再現するためである．本研究で対象としている帯状欠陥の拡

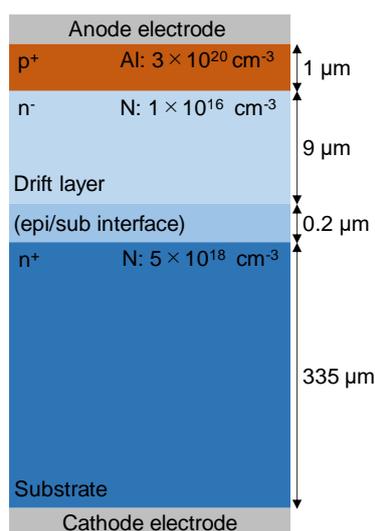


Fig. 6.7. Schematic diagram of pin diode in device simulations.

大起点はエピ/サブ界面における BPD/TED 変換点であるため²¹, 拡大起点のドーピング密度を中間層のドーピング密度に対応させる事により解析を行う。中間のドーピング密度として $5 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$ を設定した。実験で測定された拡大閾値電流密度を入力に, デバイスシミュレーションにより中間のホール密度を求める事により, 閾値電流密度を臨界少数キャリア密度へと変換した。

6.6. 結果と考察

6.6.1. FEM 解析

解析で使用した材料特性および Cu 板との接合による熱応力について, FEM 解析の妥当性の確認を行った。FEM 解析の妥当性の確認には第3章, 第4章で開発したラマンシフトの変化を用いる手法を用いた。Fig. 6.8 にラマン分光測定における測定範囲を示す。Al 電極の端部直下の $20 \mu\text{m} \times 15 \mu\text{m}$ の領域に対して測定を行った。主な測定条件は第4章と同一である。Fig. 6.9 に応力解析とラマン分光測定により得られたラマン振動数変化の分布を示す。ラマン分光測定, 応力解析ともに, 電極の影響を大きく受けない領域では $0.1 \sim 0.17 \text{cm}^{-1}$ 程度高波数側にシフトしており, Ni コンタクト部では高波数側への振動数変化が集中していることがわかる。これは, 測定領域全体において圧縮応力がやや支配的であることに対応する。この FEM 解析の目的は, 積層欠陥の拡大起点であるエピ/サブ界面の分解せん断応力を明らかにすることであるため, SiC/電極界面から $10 \mu\text{m}$ 付近の応力分布が重要となる。(b)で示した応力解析の結果では, Ni コンタクト部に生じている強い圧縮応力の影響を受けて Ni

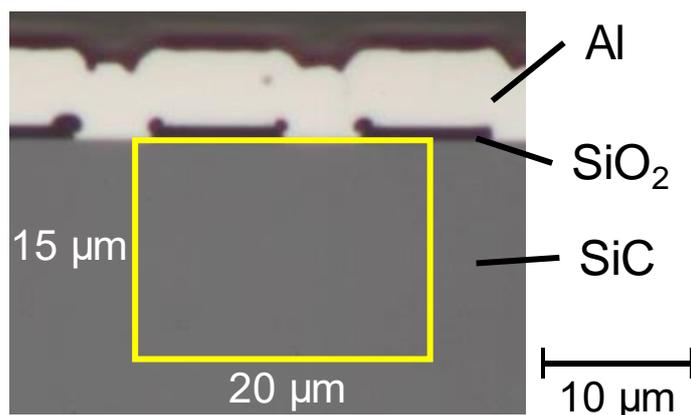


Fig. 6.8. Measurement area of Raman spectroscopy.

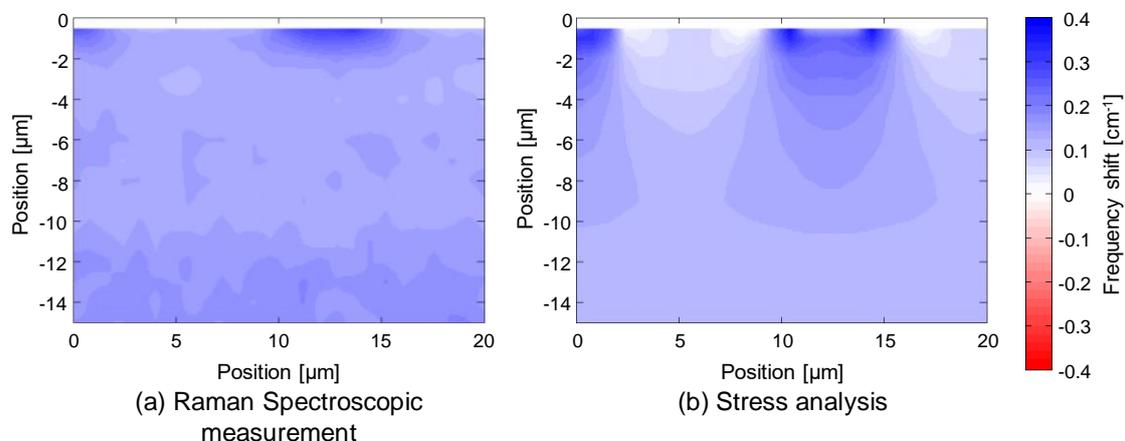


Fig. 6.9. Distribution of Raman frequency shift (E_2 mode) obtained by (a) Raman spectroscopy and (b) stress analysis.

コンタクト下部で高波数側へと振動数に変化している事がわかる。サピ/サブ界面付近の振動数変化は $0.1 \sim 0.13 \text{ cm}^{-1}$ 程度で、基板層とエピ層では明確な振動数変化の違いは見られなかった。一方で、(a)に示すラマン分光測定結果では、電極の影響により振動数が変化する領域はあまり広がらないことがわかった。またエピ層の振動数変化は 0.13 cm^{-1} 程度であるのに対し、基板層の振動数変化は $0.14 \sim 0.17 \text{ cm}^{-1}$ と、エピ層と基板層で振動数変化に僅かな差が見られた。エピ/サブ界面で生じる応力分布の違いが、エピ層を成膜した際に生じた真性応力にある、すなわち基底面内の2軸等方応力が作用していると仮定した場合、この振動数変化はエピ層に約 $5 \sim 10 \text{ MPa}$ 程度の引張応力が作用していると考えられることができる。このように応力解析とラマン分光測定で見られる振動数変化の分布の傾向に僅かな違いが見られた原因については、第4章で述べたデバイス構造の不均一性に加え、測定条件の影響(断面

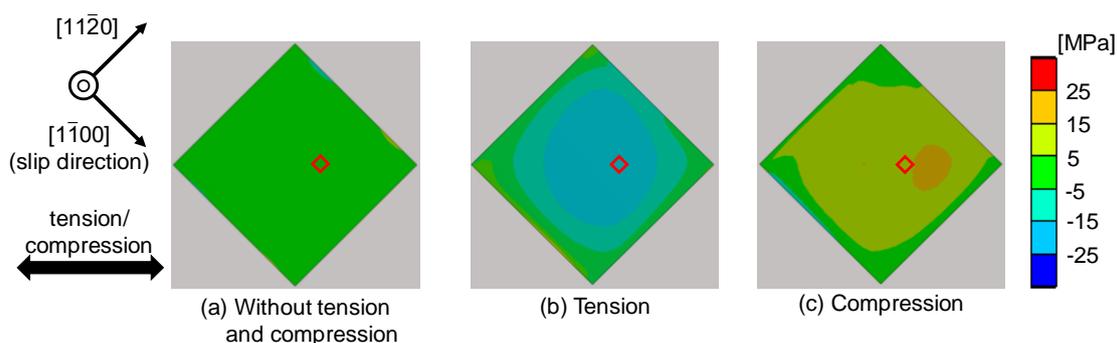


Fig. 6.10. Distribution of critical resolved shear stress at 100 ° C obtained by global analysis. The part surrounded by the red frame is one of the original point of the stacking fault expansion, where the result of the local analysis is shown in Fig. 6.10.

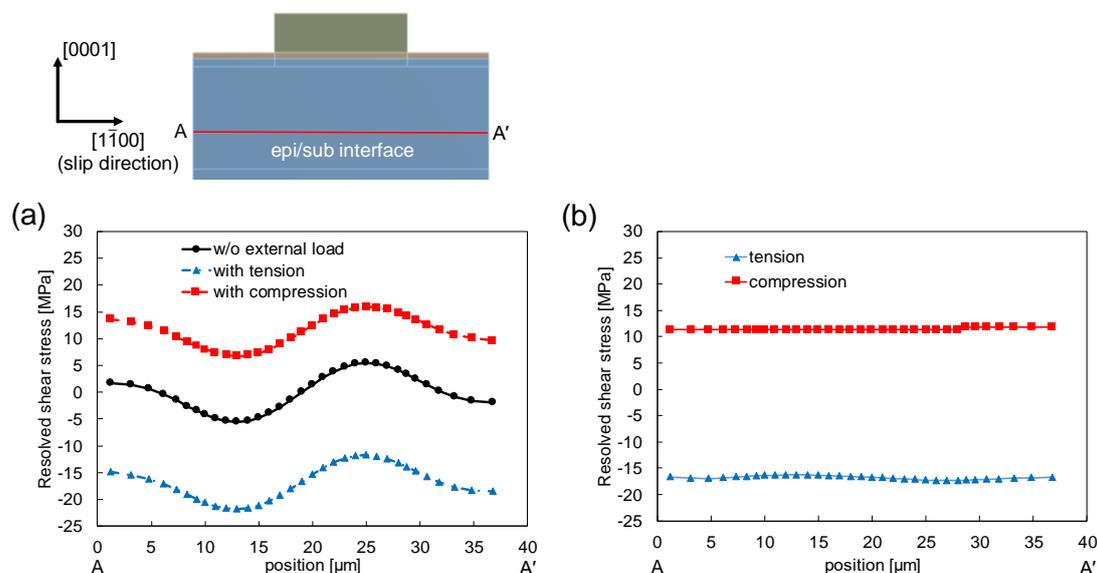


Fig. 6.11. Distribution of (a) resolved shear stress at epi/sub interface and (b) resolved shear stress loaded by the 4-point bending, obtained by local analysis using a part of the region surrounded by a red frame in Fig. 6.10.

研磨による残留応力や顕微ラマン測定に使用したレーザー光の進入深さや強度分布等) が考えられる。但し、振動数の差は大きくないため、ラマン振動数変化の分布違いから疑われる、FEM 解析結果の不確実性は以降の考察に影響を与えないと考えられる。

生じた分解せん断が最も大きかった斜め配置の場合について、Fig. 6.10 に全体解析で得られた分解せん断応力の分布を示す。斜め配置の場合、引張、圧縮ともに4点曲げにより最大20 MPa程度の分解せん断応力が生じることがわかった。一方で、pin ダイオードをCuプレ

ートと接合したことにより生じた熱応力はせん断応力を殆ど生じさせなかった。Fig. 6.11(a)に電極の詳細構造による残留応力まで考慮した pin ダイオードの 100 °Cにおける詳細解析の結果を示す。pin ダイオードの残留応力により生じる分解せん断応力の空間的な変動は最大で ± 5 MPa 程度であった。これは Al 電極の熱応力によるものである。エピ/サブ界面全体での平均値は全体解析で得られた分解せん断応力とはほぼ一致していた。このことより、電極の微細構造の残留応力は分解せん断応力の平均値には影響を与えず、測定結果の不確かさの原因とのみなることがわかった。

拡大起点の位置は応力の負荷では変わらないため、4点曲げにより負荷した応力に注目するためには、同じ位置の分解せん断応力についての無荷重状態と引張/圧縮状態との差に注目する必要がある。Fig. 6.11(b) に詳細解析において実験により負荷された分解せん断応力の分布を示す。4点曲げ実験により付加された分解せん断応力のみ注目すると、その空間的な不確かさは最大 2 MPa 程度に収まることがわかった。実験で得られた観察像の解像度では、積層欠陥拡大起点と pin ダイオードの微細構造の位置関係は不明である。そのため、pin ダイオードの残留応力に起因する分解せん断応力の変動は応力解析における不確かさとして扱った。分解せん断応力と少数キャリア密度の変化の関係の考察には、詳細解析におけるエピ/サブ界面の分解せん断応力の平均値を用いることとした。

6.6.2. デバイスシミュレーションの妥当性確認

デバイスシミュレーションに必要なパラメータの直接の測定は難しいため、実験で用いた pin ダイオード簡易的な比較として順方向の電流電圧特性 (I_f - V_f 特性) の比較を行った。Fig. 6.12 に比較の結果を示す。解析における接触抵抗は、10 m Ω と設定した。立ち上がり電

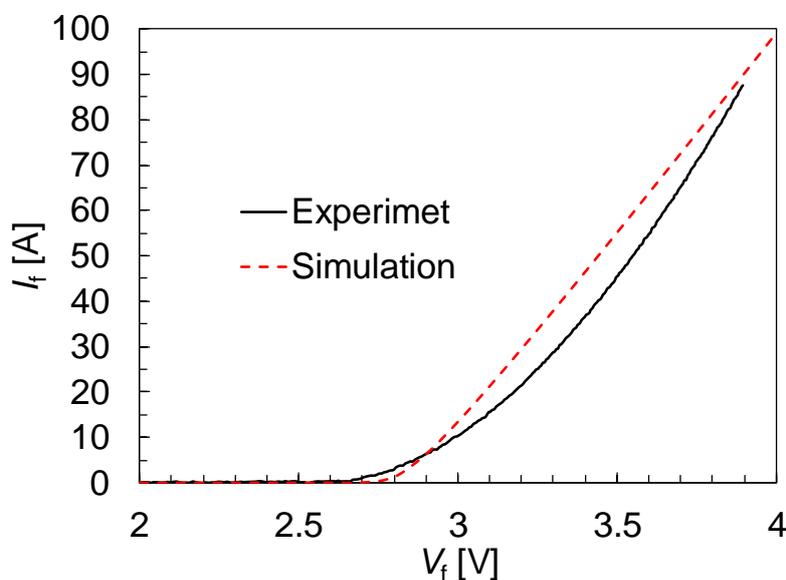


Fig. 6.12. Forward current voltage characteristics in experiment and analysis

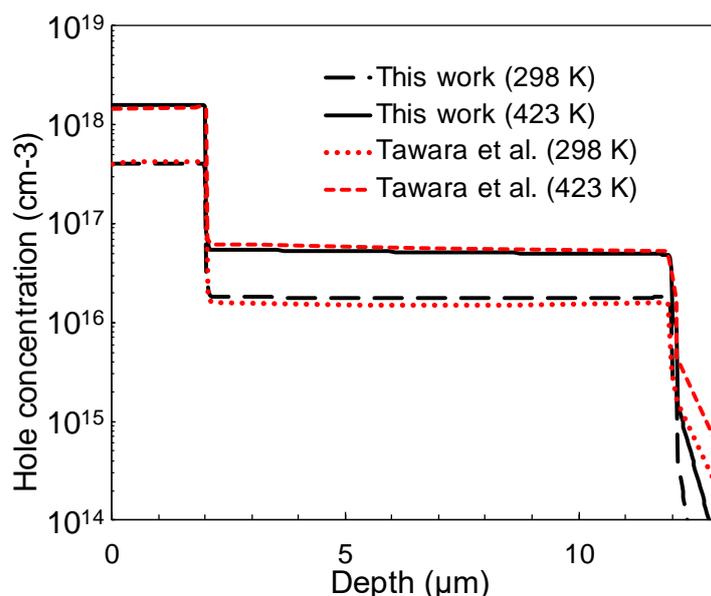
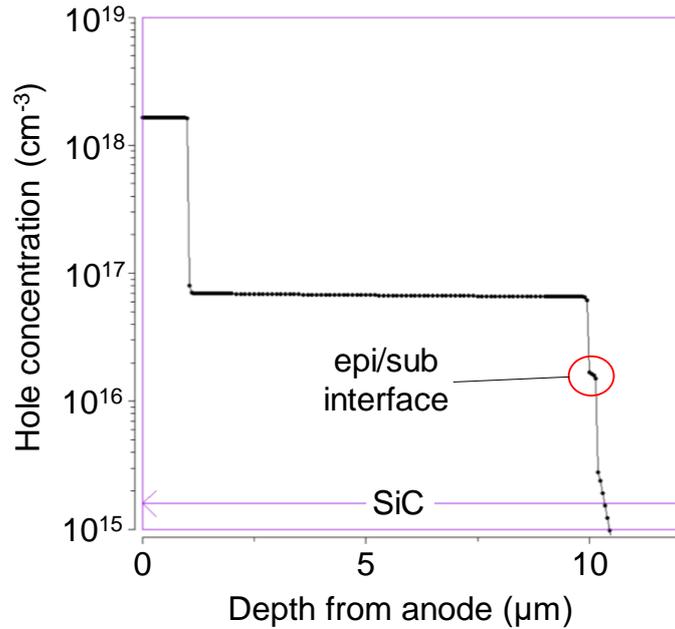


Fig. 6.13. Distribution of hole density used for validation. The validity of the hole density set in this study was confirmed by comparing the results obtained in this study with Fig. 9 of Tawara et al.¹⁶

圧は実験では約 2.65 V，解析では約 2.75 V であった。実験と解析において同様の特性が得られたため，本研究に使用したデバイス特性はおおむね妥当であると考えられる。

デバイス依存のパラメータとして設定した p 層，n⁺層のキャリア寿命の妥当性の確認は，同様のデバイスを用いた Tarawa らの結果¹⁶とホール密度を比較することにより行った。デバイスの構造は先行研究に合わせ，2 μm の p 層 (Al: $1.0 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$)，10 μm の n⁻ドリフト層 (N: $1.0 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$)，0.12 μm のバッファー層 (N: $4.0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$)，n⁺基板 (N: $6.0 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$)とした。また，p 層のホール密度を先行研究と一致させるため，Al のイオン化エネルギー E_A は 300 K では 0.15，423 K で 0.13 とした。電流密度 100 A/cm² を流した時のホール密度の分布を比較した。Fig. 6.13 に本解析で得られたホール密度の分布の先行研究との比較を示す。300 K，423 K のどちらの場合でもドリフト層のホール密度は先行研究とよく一致した。p 層や n⁺層の多数キャリア密度はキャリア寿命の影響をあまり受けず一定であるのに対し，ドリフト層における少数キャリア密度の分布は p 層，ドリフト層，n⁺層のキャリア寿命やキャリアの移動度により大きく変化する。そのため，ドリフト層のホール密度が先行研究とよく一致していることから，本研究で設定したキャリア寿命やキャリア移動度は妥当であると考えられる。

Fig. 6.14 に構築したデバイスシミュレーションによって得られるホール密度分布の例を示す。温度は 100 °C，電流密度は 300 A/cm² に設定されている。図中の赤い丸で囲われた部分が帯状欠陥の拡大起点として想定してるエピ/サブ界面におけるホール密度分布になる。


 Fig. 6.14. Hole distribution of pin diode at 100 °C and 300 A/cm².

本研究ではこのエピ/サブ界面領域の中間点のホール密度を積層欠陥拡大起点のホール密度として使用した。

6.6.3. 分解せん断応力が臨界少数キャリア密度へ与える影響

Fig. 6.15 に積層欠陥拡大起点での分解せん断応力と積層欠陥拡大開始時のホール密度の関係を示す。本計算で得られた積層欠陥拡大の臨界キャリア密度 ρ の分解せん断応力 τ_{RSS} [MPa] 依存性は、線形回帰により、

$$\rho_{\text{th}} = \{(-0.04 \pm 0.01)\tau_{\text{RSS}} + (1.91 \pm 0.08)\} \times 10^{16} \text{ cm}^{-3} \quad (6.26)$$

であった。臨界少数キャリア密度は $1.91 \pm 0.08 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ 程度と、先行研究で報告されている値¹⁶である $1.6 - 2.5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ ($N_d = 4 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$)と同程度であった。

応力の影響についてより注目するために、分解せん断応力による臨界少数キャリア密度の変動について考える。本研究で得られた分解せん断応力と臨界少数キャリア密度の変化量の関係を Fig. 6.16 に示す。本研究で実験と解析により得られた分解せん断応力が加わることによるホール密度の変化は、線形近似の傾きより

$$\left. \frac{\partial \rho}{\partial \tau_{\text{ext}}} \right|_{\rho=\rho_{\text{th}}}^{(\text{exp.})} = (-0.04 \pm 0.01) \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}/\text{MPa}, \quad (6.27)$$

であった。これは、2.3 で理論予測された $(-0.03 \pm 0.02) \times 10^{16} [\text{cm}^{-3}/\text{MPa}]$ と一致している。このことより、式(6.4)に基づく積層欠陥の拡大/縮小の判定は、バイポーラ劣化に対する応力の影響を予測可能であると考えられる。

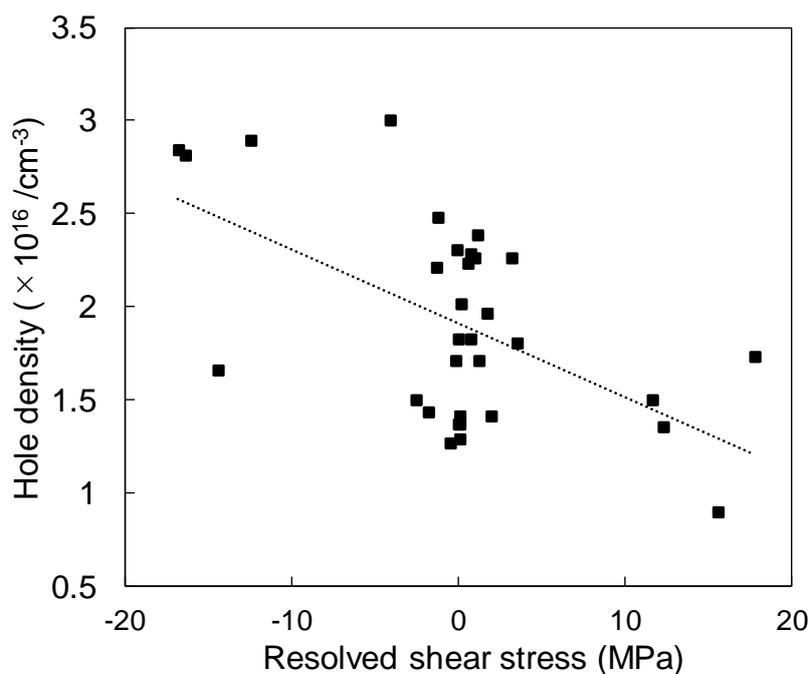


Fig. 6.15. Relationship between resolved shear stress and hole density at the origin of the stacking fault expansion. $N_d = 5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ is assumed. The dotted lines are approximate lines of the plot.

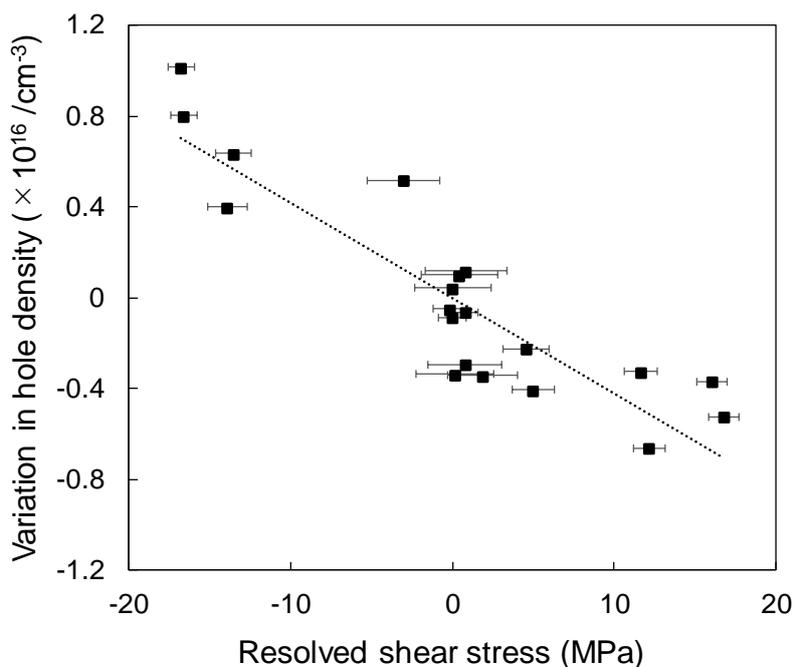


Fig. 6.16. Relationship between resolved shear stress applied by stress test and the variation in critical minority carrier density. $N_d = 5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ is assumed. Each data point shows the stress uncertainty caused by the detailed structure of the pin diode. The dotted lines are approximate lines of the plot.

Table 6.5. Critical minority carrier density and its stress dependence when the assumed doping density of the epi / sub interface is changed.

Assumed N_d [cm^{-3}]	1×10^{17}	5×10^{17}	1×10^{18}
ρ_{th} [$\times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$]	4.86 ± 0.16	1.91 ± 0.08	1.24 ± 0.05
$\left. \frac{\partial \rho}{\partial \tau_{\text{ext}}} \right _{\rho=\rho_{th}}$ [$\times 10^{16} \text{ cm}^{-3}/\text{MPa}$]	-0.09 ± 0.01	-0.04 ± 0.01	-0.03 ± 0.01

解析で得られた臨界少数キャリア密度の不確定性について検討する、エピ/サブ中間層のドーピング密度を $N_d = 1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ および $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ と仮定した場合の結果を Table 6.5 に示す。デバイスシミュレーションで得られる少数キャリア密度や応力依存性の傾きは、仮定するドーピング密度に依存することがわかった。ただし、その場合にも応力依存性の傾きの変化は2倍程度であった。林らの実験²²によりエピ/サブ界面からの深さにより帯状欠陥が拡大する閾値電流密度が変化することが報告されている。エピ/サブ界面近傍ではドーピング密度が急激に変化していると考えられるため、より詳細な解析のためには拡大起点の位置を含めた整理が必要となる。

6.7. 本章のまとめ

本章では、順方向劣化現象で積層欠陥拡大の臨界少数キャリア密度へ応力が与える影響を明らかにするため、拡大閾値電流の応力依存性を明らかにした4点曲げ実験の結果を基に、応力解析、デバイスシミュレーションの構築を行った。

応力解析では、電極の微細な構造が与える影響も含めてエピ/サブ界面の分解せん断応力を明らかにするため、サブモデリング解析を実施した。サブモデリング解析により、電極の微細構造により分解せん断応力そのものにはばらつきが生じるが、4点曲げにより加えた応力変化に対してはばらつきの影響は大きくないことがわかった。

デバイスシミュレーションでは、SiCに対応した解析を行うための物理モデル、パラメータを導入し解析を行った。デバイス依存となるキャリア寿命については、本研究と同様のデバイスを対象に行われた解析結果との比較によりその妥当性を確認した。解析により得られた積層欠陥拡大開始時の少数キャリア密度は、 $1.91 \pm 0.08 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ であり、先行研究での実験値と同程度であった。

最後に、臨界少数キャリア密度に応力が与える影響についての検討を行った。転位論とQWAモデルを組み合わせることにより、分解せん断応力による臨界少数キャリア密度の変化は $-0.03 \pm 0.02 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}/\text{MPa}$ 程度であると予測された。一方で、実験に基づく解析結果

では、 $-0.04 \pm 0.01 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}/\text{MPa}$ 程度であり、理論予測と解析結果は概ね一致していた。このことから、応力による臨界少数キャリア密度の変動は、転位論を拡張したモデルにより解釈可能であると考えられる。ただし、デバイスシミュレーションで得られる少数キャリア密度や応力依存性の傾きは、仮定するエピ/サブ界面のドーパ密度に依存した。より高精度なモデル化には、積層欠陥拡大起点のエピ/サブ界面からの距離や、ドーパ密度を明確にした上での整理が必要である。

本章の参考文献

- ¹ A. Iijima and T. Kimoto, *J. Appl. Phys.* **126**, 105703 (2019).
- ² A. Goryu, A. Kano, M. Kato, C. Ota, A. Okada, J. Nishio, S. Izumi, and K. Hirohata, *Mater. Sci. Forum* **963**, 288 (2019).
- ³ N. KOTANI, in *Proc SISPAD, 1998* (1998).
- ⁴ 中村光利, *応用物理* **77**, 818 (2008).
- ⁵ R. Martin, M. Heinz, and H. Reinhard, *IEEE Trans. Electron Devices* **41**, 1040 (1994).
- ⁶ S. Bellone, F.G.D. Corte, L.F. Albanese, and F. Pezzimenti, *IEEE Trans. Power Electron.* **26**, 2835 (2011).
- ⁷ G. De Martino, F. Pezzimenti, F.G. Della Corte, G. Adinolfi, and G. Graditi, *PRIME 2017 - 13th Conf. PhD Res. Microelectron. Electron. Proc.* 221 (2017).
- ⁸ L.F. ALBANESE, *Modeling and Simulation of 4H-SiC Power Diodes*, Università degli Studi di Salerno Dipartimento, 2010.
- ⁹ M.L. Megherbi, F. Pezzimenti, L. Dehimi, M.A. Saadoun, and F.G. Della Corte, *IEEE Trans. Electron Devices* **65**, 3371 (2018).
- ¹⁰ R. Scaburri, *The Incomplete Ionization of Substitutional Dopants in Silicon Carbide*, Università di Bologna, 2011.
- ¹¹ A. Koizumi, J. Suda, and T. Kimoto, *J. Appl. Phys.* **106**, 013716 (2009).
- ¹² C. Darmody and N. Goldsman, *J. Appl. Phys.* **126**, (2019).
- ¹³ T. Hatakeyama, K. Fukuda, and H. Okumura, *IEEE Trans. Electron Devices* **60**, 613 (2013).
- ¹⁴ T. Watanabe, R. Hattori, M. Imaizumi, and T. Oomori, *Jpn. J. Appl. Phys.* **47**, 2841 (2008).
- ¹⁵ R. Mickevičius and J.H. Zhao, *J. Appl. Phys.* **83**, 3161 (1998).
- ¹⁶ T. Tawara, S. Matsunaga, T. Fujimoto, M. Ryo, M. Miyazato, T. Miyazawa, K. Takenaka, M. Miyajima, A. Otsuki, Y. Yonezawa, T. Kato, H. Okumura, T. Kimoto, and H. Tsuchida, *J. Appl. Phys.* **123**, 025707 (2018).
- ¹⁷ P.A. Ivanov, M.E. Levinshtein, A.K. Agarwal, S. Krishnaswami, and J.W. Palmour, *IEEE Trans. Electron Devices* **53**, 1245 (2006).

- ¹⁸ 山口憲 and 富澤一隆, 非平衡電子輸送論—半導体デバイスシミュレーション— (アドバンスソフト, Tokyo, 2011).
- ¹⁹ A. Galeckas, J. Linnros, V. Grivickas, U. Lindefelt, and C. Hallin, *Appl. Phys. Lett.* **71**, 3269 (1997).
- ²⁰ U. Lindefelt, *J. Appl. Phys.* **84**, 2628 (1998).
- ²¹ T. Kimoto, A. Iijima, H. Tsuchida, T. Miyazawa, T. Tawara, A. Otsuki, T. Kato, and Y. Yonezawa, *2017 IEEE Int. Reliab. Phys. Symp. 2A* (2017).
- ²² S. Hayashi, T. Yamashita, J. Senzaki, T. Kato, Y. Yonezawa, K. Kojima, and H. Okumura, *Appl. Phys. Express* **12**, 051007 (2019).
- ²³ B.Y.F.M. Hosking, J.J. Stephens, J. a. Rejent, F.M. Hosking, J.J. Stephens, and J. a. Rejent, *Weld. J.* **78**, 127 (1999).
- ²⁴ L.A. Navarro, X. Perpiñà, M. Vellvehi, V. Banu, and X. Jordà, *Microelectron. Reliab.* **52**, 2314 (2012).
- ²⁵ 清峰金属工業, 52100 (2018).
- ²⁶ A.H. Gomes de Mesquita, *Acta Crystallogr.* **23**, 610 (1967).
- ²⁷ S.Y. Davydov, *Semiconductors* **41**, 696 (2007).
- ²⁸ T. Kimoto and J.A. Cooper, *Fundamentals of Silicon Carbide Technology* (John Wiley & Sons Singapore Pte. Ltd, Singapore, 2014).

第7章 結言

7.1. 結論

本研究では、4H-SiC パワーデバイスの信頼性設計に必要となる応力分布や応力が順方向劣化現象へ与える影響を明らかにすることを目的に研究に取り組んだ。以下に各章の成果をまとめる

第3章、第4章では4H-SiC パワーデバイスの応力解析手法の開発を行った。従来のラマン分光法のみを用いた応力分布評価において課題となっていた、応力とラマンシフト変化の定量的な関係が明らかになっていない点、ラマン分光法のみでは応力分布を成分毎に分解して評価することができない点について課題解決を行った。

第3章ではラマン分光測定を用いて応力分布を評価する上で必要となる4H-SiCのフォノン変形ポテンシャル係数の全成分を第一原理計算により明らかにした。基底面内での2軸等方応力や c 軸方向の1軸応力では、変形ポテンシャルと計算結果は非常に良い一致を示した。一方で、基底面内でのせん断変形においては変形が大きくなるにつれて計算結果が変形ポテンシャルを用いた計算式に従わなくなることが確認された。これは大きなせん断変形により結晶の対称性が崩れ原子配置が変化したためであると考えられる。先行する実験結果との比較により、本研究で求めた変形ポテンシャルの妥当性を確認した。

第4章では4H-SiC パワーデバイスの残留応力分布を成分毎に求めるため、FEMとラマン分光法の組み合わせる解析手法の開発を行った。応力分布を高精度に求めるため、電極パターンを持たない平坦膜を成膜したサンプルに対し反り測定とナノインデンテーション測定を行うことによってSiC上に作成した薄膜のヤング率と線膨張係数、真性応力の測定を行った。測定結果を用いてFEM上で製造プロセスを再現した応力解析を行うことにより、SiCデバイスの残留応力を求めた。得られた応力分布を第3章で求めたフォノン変形ポテンシャルを用いてラマンシフト分布へと変換し、ラマン分光測定で得られた結果と比較することにより、FEMによる応力解析結果の妥当性の確認を確認した。また、解析により得られたデバイス中の残留応力について考察を行った。最後に、開発した応力解析手法を用いてSiC-MOSFETの応力解析を行った。

第5章、第6章では順方向劣化問題について信頼性設計に必要となる、熱・応力が現象へ与える影響についての定量的なモデル化に取り組んだ。具体的には、順方向劣化の原因となる積層欠陥の拡大について、キャリアトラップによる電氣的なエネルギー利得によって積層欠陥エネルギーが低下すると考えるQWAモデルに基づき、これまでに定量的な検討が十

分に行われていない積層結果エネルギーの温度依存性と外部応力が現象へ与える影響の定量化を行った。

第5章では4H-SiCのシングルショックレー型積層欠陥(SSSF)、ダブルショックレー型積層欠陥(DSSF)それぞれについて積層欠陥エネルギーの温度依存性を明らかにするため、第一原理計算と調和振動近似および擬調和振動近似を用いてフォノンの自由エネルギーを計算した。SSSFの積層欠陥エネルギーは室温で 14.9 mJ/m^2 程度、 1500 K で 12.8 mJ/m^2 程度であり、高温での値は実験結果と一致した。また、熱膨張の影響を受け積層欠陥エネルギーが僅かに低下することがわかった。一方で、DSSFの積層欠陥エネルギーは室温で 8 mJ/m^2 程度、 1500 K で 11 mJ/m^2 程度であり温度が上がると積層欠陥エネルギーも大きくなることがわかった。本研究で得られた計算結果を順方向劣化現象において提案されているエネルギーモデルへと適用することにより、積層欠陥が拡大する臨界少数キャリア密度は $1 \times 10^{16} \sim 1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ 程度であると予測された。この密度は実験結果と一致しており、本計算結果を用いることで積層欠陥の拡大/縮小についての定量的な予測が可能となった。

第6章では、順方向劣化現象で積層欠陥拡大の臨界少数キャリア密度へ応力が与える影響を明らかにするため、拡大閾値電流の応力依存性を明らかにした4点曲げ実験の結果を基に、応力解析、デバイスシミュレーションの構築を行った。応力解析では、電極の微細な構造が与える影響も含めてエピ/サブ界面の分解せん断応力を明らかにするため、サブモデリング解析を実施した。サブモデリング解析により、電極の微細構造により分解せん断応力そのものには不確実性が生じるが、4点曲げにより加えた応力変化に対しては不確実性の影響は大きくないことがわかった。デバイスシミュレーションでは、SiCに対応した解析を行うための物理モデル、パラメータを導入し解析を行った。デバイス依存となるキャリア寿命については、本研究と同様のデバイスを対象に行われた解析結果との比較によりその妥当性を確認した。解析により得られた積層欠陥拡大開始時の臨界少数キャリア密度は、 $1.91 \pm 0.08 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ であり、第5章での予測値や先行研究での実験値と同程度であった。

最後に、臨界少数キャリア密度に応力が与える影響についての検討を行った。転位論とQWAモデルを組み合わせた理論に基づき、先行研究での結果を用いることにより、分解せん断応力による臨界少数キャリア密度の変化は $-0.03 \pm 0.02 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}/\text{MPa}$ 程度であると予測された。一方で、実験に基づく解析結果では、 $-0.04 \pm 0.01 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}/\text{MPa}$ 程度であり、理論予測と解析結果は概ね一致していた。このことから、応力による臨界少数キャリア密度の変動は、転位論を拡張したモデルにより解釈可能であると考えられる。ただし、デバイスシミュレーションで得られる少数キャリア密度や応力依存性の傾きは、仮定するエピ/サブ界面のドーブ密度に依存した。

7.2. 展望

本研究で開発した応力解析手法の発展として、物理モデルに基づいた電気特性変動に関する熱・応力・電気の連成シミュレーションの開発が望まれる。これまでにはパワーモジュールについての連成回路解析手法が共同研究により開発されているが、デバイス特性そのものの変動については十分な検討が行われていない。シリコンデバイスに対するデバイスシミュレーションでは応力の影響を電子移動度の変化として取り込む手法が導入されている。4H-SiC デバイスに対しても、応力による電気特性の変化を物理モデル化し、3次元デバイスシミュレーションと3次元有限要素法解析を組み合わせた解析手法を開発できれば、デバイス設計の段階からの検討や設計へのフィードバックが可能となると考えられる。また、応力解析手法そのものについても、本研究では顕微ラマン分光法による2次元的のラマンシフト分布を用いた評価を行っているため、内部の直接の測定、評価はできていない。SiCはレーザー光の侵入深さが深いため、材料内部まで光を当てることができる。そのため、材料内部まで光を照射し深さ方向の分解が可能である共焦点ラマン分光法による3次元のラマンシフト分布を取得、評価することにより応力解析手法の向上が図れると考えている。また、本研究で構築した応力解析手法は原理的にはラマン分光法による応力評価が適用可能であれば他の材料にも適用ができる。そのため、本研究の同様の応力解析手法を他のワイドバンドギャップ半導体に対して構築する事により、SiC デバイス以外のパワーデバイスの発展への貢献も期待される。

順方向劣化現象については、本研究では転位移動の駆動力に注目して理論モデルに基づき解析、議論を行った。そのため、今後の課題として転位の成分や形状の影響についての議論が必要となると考えられる。特に帯状欠陥の拡大起点である BPD/TED 変換点では、BPD/TED 変換に伴う部分転位の収縮や複雑な応力場の形成が考えられるため、転位の形状や転位の応力場についてのさらなる議論を行う必要があると考えている。また、すでに十分な欠陥低減がなされている Si デバイスについても、デバイス製造工程で生じる転位が未だに課題となっている。そのため、4H-SiC デバイスについても転位の発生や動きに注目した研究が今後重要になっていくと考えている。Si デバイスでは転位動力学シミュレーションを用いた転位発生、移動予測が行われており、今後 4H-SiC についても同様の転位動力学シミュレーションの開発が期待される。特に順方向劣化現象では、電氣的な影響による積層欠陥エネルギーの低下まで含んだ、電気・熱・応力全ての影響を統合した転位動力学シミュレータの開発が望まれる。

付録：LDA と GGA の比較

本論文では、第一原理計算において交換相関汎関数として、第3章のフォノン変形ポテンシャルの算出では局所密度近似 (Local Density Approximation; LDA) を、第5章の積層欠陥エネルギーの温度依存性の算出には一般化密度勾配近似 (Generalized Gradient Approximation; GGA) を使用している。本章では、第一原理計算において LDA と GGA を使用した場合の違いについて、4H-SiC を対象に比較結果を示す。

A.1. 密度汎関数法

第一原理計算 (first principles calculation もしくは *ab initio* calculation) はシュレディンガー方程式を数値計算により求めるための計算手法である。密度汎関数法 (Density functional theory; DFT) は広く用いられている第一原理計算手法の一つである。ボルン・オッペンハイマー近似により、 N 個の電子が存在する場合の時間非依存のシュレディンガー方程式は、

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \nabla_i^2 + \sum_{i=1}^N V(\mathbf{r}_i) + \sum_{i=1}^N \sum_{j<i}^N U(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \right] \psi = E\psi, \quad (\text{A.1})$$

で表される。ここで、 m は電子の質量である。右辺は左から順に、電子の運動エネルギー、電子と原子核の相互作用、異なる電子同士の相互作用を示す。 \mathbf{r}_i は電子 i の座標を示し、電子の波動関数 ψ は N 個の電子の座標の関数として、 $\psi = \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ で表される。この方程式を直接解くことは困難であるため、途中の導出は省略するが、DFT 計算では他電子系を次の Kohn-Sham 方程式と呼ばれる 1 電子方程式により表現している。

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) + e^2 \int \frac{n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3r' + V_{xc}(\mathbf{r}) \right] \psi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i \psi_i(\mathbf{r}). \quad (\text{A.2})$$

左辺はそれぞれ、電子の運動エネルギー、電子 1 つと全ての原子核間のクーロン相互作用、全電子密度と 1 つの電子の相互作用を表すハートリー相互作用、交換相互作用である。また、 $n(\mathbf{r})$ は電子密度で、

$$n(\mathbf{r}) = \sum_i |\psi_i(\mathbf{r})|^2, \quad (\text{A.3})$$

で与えられる。交換相互作用 $V_{xc}(\mathbf{r})$ は交換相関汎関数 $E_{xc}(\mathbf{r})$ を用いて

$$V_{xc}(\mathbf{r}) = \frac{\delta E_{xc}(\mathbf{r})}{\delta n(\mathbf{r})}, \quad (\text{A.4})$$

と表される．この $E_{xc}(\mathbf{r})$ の近似関数形により，同じ DFT 計算でも LDA や GGA といった区分がなされる．

LDA は交換相関汎ポテンシャルが空間的な各点での電子密度の値に対応する一様電子ガスの交換相関ポテンシャルに等しいと仮定し， $E_{xc}(\mathbf{r})$ を局所的な $n(\mathbf{r})$ の関数として近似している．一方 GGA は $n(\mathbf{r})$ に加え，電子密度の勾配まで近似している．GGA では勾配の近似方法により，PBE や PW91 等複数の GGA 汎関数が用いられている．一般的には，GGA は LDA より物性値をよく再現するとされているが，対象となる系や求めたい物性値によりどちらがより高精度な計算結果と与えるかは異なってくる．以下では 4H-SiC を例に，その比較を示す．

A.2. LDA と GGA の比較: 4H-SiC の場合

まず，原子間の平衡距離について考える．Table A.1 に 4H-SiC の格子定数の比較を示す．なお，計算条件は第 3 章と同様にプリミティブ格子に対して， k 点が $12 \times 12 \times 4$ (Monk-horst pack 法)，カットオフエネルギーが 36 Hartree である．格子定数は GGA では実験値に比べ 0.4 % 大きく，LDA では実験値に比べ約 1.0 % 小さかった．格子定数のみを考えると，GGA での計算のほうがより実験値を再現している．次に，Table A.2 に弾性率についての比較を示す．GGA を用いた計算結果は実験結果とよく一致している一方で，LDA を用いた計算結果は実験結果に比べやや大きい結果になった．これらの比較より，LDA は GGA に比べ 4H-SiC を”硬めに”表現している事がわかる．また，弾性的性質については GGA の方が実験値に近い値を示すことがわかった．

次に，フォノンの性質について検討する．Table A.3 に Γ 点におけるラマン活性なフォノ

Table A.1. Dependence of lattice constant on exchange-correlation functional and comparison with experimental value. Values in parentheses indicate percentages based on experimental values.

	LDA	GGA	Experiment ^{1,2}
a (Å)	3.047 (-1.0 %, -1.2 %)	3.092 (+0.4 %, +0.3 %)	3.079, 3.082
c (Å)	9.977 (-1.0 %, -0.8 %)	10.121 (+0.3 %, +0.6 %)	10.081, 10.052
c/a	3.27	3.27	3.27, 3.26

Table A.2. Dependence of elastic constants (GPa) on exchange correlation functional and comparison with experimental value. Values in parentheses indicate percentages based on experimental values.

	LDA	GGA	Experiment ²
C_{11}	523.7 (103.1 %)	503 (99.2 %)	507 ± 4
C_{33}	575.5 (105.1 %)	535 (97.8 %)	547 ± 4
C_{44}	168.5 (105.6 %)	159 (100 %)	159 ± 7
C_{12}	113.0 (104.6 %)	108 (100 %)	108 ± 5
C_{13}	51.7 (99.4 %)	50 (96.2 %)	52 ± 9 (value of 6H-SiC)

Table A.3. Dependence of Raman-active phonon frequencies (cm^{-1}) on exchange correlation functional and comparison with experimental value. Values in parentheses indicate percentages based on experimental values⁴⁻⁶.

A ₁ (A, TO)			E ₁ (A, TO)			E ₂		
LDA	GGA	Exp.	LDA	GGA	Exp.	LDA	GGA	Exp.
608.0 (100 %)	591 (97 %)	610	261.3 (98 %)	258 (97 %)	266	193.3 (99 %)	191 (97 %)	196
783.7 (100 %)	776 (99 %)	783	771.9	746	N.A.	201.3 (99 %)	198 (97 %)	204
843.0 (100 %)	815 (97 %)	838	799.1 (100 %)	761 (95 %)	798	780.1 (101 %)	755 (97 %)	776
						788.0	764	N.A.

ン振動数の比較を示す。LDA を用いた計算結果は実験結果とよく一致する一方で、GGA を用いた計算結果は実験結果に比べ若干低い値を示した。一般に、フォノン計算においては GGA では LDA よりもフォノン振動数が低く計算されることが知られている³。

以上の結果をまとめると、GGA は LDA に比べ、格子定数が大きく、弾性率が小さく、フォノン振動数が小さいという特徴が見られる。よって、力学的な観点からは GGA を用いた計算は LDA に比べ相対的に結晶を「柔らかく」表現する傾向があることがわかる。ただし、LDA と GGA のどちらがより実験結果をよく再現するかについては、対象とする物性値により異なることがわかった。

- ¹ M. Stockmeier, R. Müller, S.A. Sakwe, P.J. Wellmann, and A. Magerl, *J. Appl. Phys.* **105**, 033511 (2009).
- ² K. Kamitani, M. Grimsditch, J.C. Nipko, C.K. Loong, M. Okada, and I. Kimura, *J. Appl. Phys.* **82**, 3152 (1997).
- ³ B. Grabowski, T. Hickel, and J. Neugebauer, *Phys. Rev. B* **76**, 024309 (2007).
- ⁴ D.W. Feldman, J.H. Parker, W.J. Choyke, and L. Patrick, *Phys. Rev.* **173**, 787 (1968).
- ⁵ H. Harima, S. Nakashima, and T. Uemura, *J. Appl. Phys.* **78**, 1996 (1995).
- ⁶ S. Nakashima and H. Harima, *Phys. Status Solidi Appl. Res.* **162**, 39 (1997).

謝辞

本論文は、東京大学大学院工学系研究科機械工学専攻 泉聡志教授のご指導のもと、著者の博士課程での研究を総括したものです。泉聡志教授には、博士課程での研究テーマの相談から研究の方針、結果の議論など多岐にわたり多くの機会と時間をいただきご指導いただきました。また、研究内容以外についても多くのアドバイスや機会を頂き、大変感謝しております。また、博士課程においては、東京大学大学院工学系研究科機械工学専攻 酒井信介名誉教授（現 横浜国立大学客員教授）、波田野明日可講師からも多くのご指導、ご支援を頂きました。また、研究室元助教の高本聡博士には本研究の根幹となる多くの部分について議論、助言をいただきました。公私ともに非常にお世話になり、大変感謝しております。お忙しい中本論文の審査をお引き受け下さり、有益な御助言いただきました東京大学大学院工学系研究科機械工学専攻 柳本潤教授、大学院生産技術研究所 梅野宜崇准教授、大学院工学系研究科マテリアル工学専攻 澁田靖准教授に感謝し、心よりお礼申し上げます。

本研究の大半は、株式会社東芝研究開発センターとの共同研究によるものです。長い期間にわたる多くの打ち合わせ、議論のみならず研究インターンや国際学会等多くの場面大変お世話になりました。MSLの牛流章弘博士、廣畑賢治博士、加納明様、加藤光章博士、EDLの西尾譲司博士、岡田葵様、大田千春様をはじめとするお世話になった多くの方に心より御礼申し上げます。また、本研究ではSIPの協力の下、産業技術総合研究所や富士電機株式会社の方々の多くのご協力をいただきました。特に、応力解析における薄膜の材料特性の測定やpinダイオードに対するラマン分光測定は、SIPでお世話になった皆様のご協力無しには成立しないものでした。また、デバイスシミュレーションの実施にあたっては、キオクシア株式会社の松澤様にご助言をいただきました。お世話になりました皆様に心より御礼申し上げます。

また本研究は、東京大学大学院工学系研究科博士課程学生特別リサーチ・アシスタント(SEUT-RA)の支援を受けて行われました。感謝いたします。

博士課程での生活では、研究内容に直接関わらない場面でも多くの方にお世話になりました。研究の相談から日常の雑談まで多くお世話になった堀琢磨准教授、研究室博士課程OBとしての姿を見せていただきとても心強かった山際謙太博士、原祥太郎准教授、熊谷知久博士、蓮沼将太助教をはじめとする皆様、卒業していった研究室の先輩方、同期、後輩のみんな、列挙すればきりがありません。皆様大変ありがとうございました。

最後に、私の博士課程への進学を認めてくれ、生活を支えてくれた家族に感謝します。

研究業績

論文

- 1) **Hiroki Sakakima**, So Takamoto, Yoichi Murakami, Asuka Hatano, Akihiro Goryu, Kenji Hirohata, Satoshi Izumi, “Development of a method to evaluate the stress distribution in 4H-SiC power devices”, Japanese Journal of Applied Physics, IOP science, **57**, 106602 (2018)
- 2) **Hiroki Sakakima**, So Takamoto, Asuka Hatano, Satoshi Izumi, “Ab initio calculation of temperature-dependent stacking fault energy of 4H-SiC and its application to an energy model of the expansion of stacking faults”, Journal of Applied Physics, (submitted)
(博士論文に含まれないもの)
- 3) Yohei Tamura, **Hiroki Sakakima**, So Takamoto, Asuka Hatano, Satoshi Izumi, “Reaction pathway analysis for the conversion of perfect screw basal plane dislocation to threading edge dislocation in 4H-SiC”, Japanese Journal of Applied Physics, IOP science, **58**, 081005 (2019)

国際会議

(ポスター発表)

- 1) **Hiroki Sakakima**, So Takamoto, Yoichi Murakami, Asuka Hatano, Akihiro Goryu, Kenji Hirohata and Satoshi Izumi, “Evaluation method for stress distribution in 4H-SiC power devices”, 12th European Conference on Silicon Carbide and Related Materials (ECSCRM 2018), MO.P.FP6, International Convention Centre, Birmingham (UK), Sep. 2018.
- 2) **Hiroki Sakakima**, So Takamoto, Yoichi Murakami, Asuka Hatano, Akihiro Goryu, Kenji Hirohata and Satoshi Izumi, “Stress analysis of 4H-SiC power devices via FEM and Raman spectroscopy”, P2-48, the 9th Multiscale Materials Modeling (MMM2018), Osaka, Oct. 2018.

国内会議 (口頭)

- 1) **榎間 大輝**, 波田野 明日可, 牛流 章弘, 廣畑 賢治, 泉 聡志, 「FEM 及びラマン分光法による 4H-SiC パワーデバイスの応力テンソル解析技術の開発」, 第 65 回応用物理学会春季学術講演会, 20p-D103-9, 早稲田大学西早稲田キャンパス, 2018 年 3 月

- 2) **榑間 大輝**, 高本 聡, 波田野 明日可, 泉 聡志, 「第一原理計算を用いた有限温度における 4H-SiC の積層欠陥エネルギーの算出」, 日本機械学会第 32 回計算力学講演会 (CMD2019), 050, 東洋大学川越キャンパス, 2019 年 9 月
- 3) **榑間 大輝**, 高本 聡, 波田野 明日可, 泉 聡志, 「第一原理計算による 4H-SiC 積層欠陥エネルギーの温度依存性の算出」, 第 5 回マルチスケール材料力学シンポジウム, 電気通信大学, 2020 年 5 月 (予定)
(博士論文に含まれないもの)
- 4) **榑間 大輝**, 波田野 明日可, 泉 聡志, 牛流 章弘, 廣畑 賢治, 「4H-SiC パワーデバイスの応力解析技術の構築」, 第 2 回マルチスケール材料力学シンポジウム O3, 名城大学天白キャンパス, 2017 年 5 月
- 5) 田村 陽平, **榑間 大輝**, 波田野 明日可, 泉 聡志, 「4H-SiC における基底面らせん転位の貫通刃状転位への変換現象に関する反応経路解析」, 第 65 回応用物理学会春季学術講演会, 19p-D103-3, 早稲田大学西早稲田キャンパス, 2018 年 3 月
- 6) 田村 陽平, **榑間 大輝**, 波田野 明日可, 泉 聡志, 「4H-SiC における基底面らせん転位の貫通刃状転位への変換現象に関する反応経路解析」, 第 79 回応用物理学会秋季学術講演会, 21a-141-1, 名古屋国際会議場, 2018 年 9 月 (国内会議(口頭) 4 の講演奨励賞受賞記念講演)

国内会議 (ポスター)

- 1) **榑間 大輝**, 高本 聡, 波田野 明日可, 泉 聡志, 牛流 章弘, 加藤 光章, 加納 明, 廣畑 賢治, 「SiC 電気特性劣化の温度・応力依存性解析法及び試験・評価法」, SIP 「次世代パワーエレクトロニクス」公開シンポジウム, 東京ガーデンテラス紀尾井町, 2019 年 3 月
- 2) **榑間 大輝**, 牛流 章弘, 加納 明, 廣畑 賢治, 波田野 明日可, 泉 聡志, 「4H-SiC の順方向劣化現象に対する応力の影響のモデリング」, 第 67 回応用物理学会春季学術講演会, 13a-PA6-4, 上智大学四谷キャンパス, 2020 年 3 月 (予定)
(博士論文に含まれないもの)
- 3) **榑間 大輝**, 村上 陽一, 泉 聡志, 牛流 章弘, 廣畑 賢治, 「4H-SiC パワーデバイスの応力解析技術の構築」, 第 77 回応用物理学会秋季学術講演会, 14p-P9-15, 朱鷺メッセ, 2016 年 9 月
- 4) **榑間 大輝**, 波田野 明日可, 泉 聡志, 牛流 章弘, 廣畑 賢治, 「転位動力学シミュレーションに基づく 4H-SiC の積層欠陥形状形成の再現」, 第 64 回応用物理学会春季学術講演会, 16a-P5-3, パシフィコ横浜, 2017 年 3 月

- 5) 田村 陽平, 榑間 大輝, 高本 聡, 波田野 明日可, 泉 聡志, 「4H-SiC における基底面部分転位の収縮および貫通刃状転位への変換現象に関する分子動力学解析」, 第 78 回応用物理学会秋季学術講演会, 5p-PB8-2, 福岡国際会議場, 2017 年 9 月
- 7) 田村 陽平, 榑間 大輝, 波田野 明日可, 泉 聡志, 「4H-SiC における基底面転位の貫通刃状転位への変換現象に関する反応経路解析」, 第 3 回マルチスケール材料力学シンポジウム, P16, 高知工科大学永国寺キャンパス, 2018 年 5 月
- 8) 平能 敦雄, 榑間 大輝, 波田野 明日可, 泉 聡志, 「4H-SiC における基底面部分転位対の表面近傍での収縮・拡張時の反応経路解析」, 第 67 回応用物理学会春季学術講演会, 13a-PA6-3, 上智大学四谷キャンパス, 2020 年 3 月 (予定)

招待講演

- 1) 榑間 大輝, 高本 聡, 村上 陽一, 波田野 明日可, 泉 聡志, 牛流 章弘, 廣畑 賢治, 「4H-SiC のフォノン変形ポテンシャルの決定とパワーデバイスの応力評価への適用」, NIMS ナノシミュレーションワークショップ 2018, 一橋大学一橋講堂, 2018 年 11 月

受賞

- 1) 第 2 回マルチスケール材料力学シンポジウム, 優秀学生講演賞, 2017 年 5 月
- 2) 第 3 回マルチスケール材料力学シンポジウム, 優秀学生講演賞, 2018 年 5 月