



SiC パワーデバイス開発のための シミュレーション 第一原理計算による SiC 熱酸化 シミュレーション手法の開発

研究・開発機関 : (財) 電力中央研究所、(独) 日本原子力研究開発機構
 利用施設 : (独) 海洋研究開発機構 地球シミュレータ
 計算規模 : 計算速度 0.64Tflops (10 ノード)
 利用ソフトウェア : 第一原理分子動力学法 VASP
 (Vienna ab initio Simulation Package)*

Before

- SiC の熱酸化のシミュレーションには、経験的なパラメータを一切用いない第一原理分子動力学計算が非常に強力なツールになります。
- 原子数が増えるにつれて計算量が膨大になるため、これまで行うことは不可能でした。

After

- 地球シミュレータを利用することにより、第一原理分子動力学計算で 100 ピコ秒を越えるような酸化過程のシミュレーションや、1000 原子を越えるアモルファス構造を持つ界面の構造をシミュレーションすることが可能となりました。

背景と目的

ワイドギャップ半導体である炭化珪素 (SiC) は従来のシリコン (Si) 系パワー半導体素子に比べて飛躍的な性能向上を実現する半導体材料として期待されており、低損失であることから省エネデバイスとして開発が進められています。SiC 半導体は Si 半導体と同様に熱酸化により酸化絶縁膜を作製できるため、次世代の MOS (Metal Oxide Semiconductor) 型パワーデバイスとして有望ですが、これまで試作された SiC MOS 型パワーデバイスは、界面トラップの存在等によりチャネル移動度が理論的な予想値よりはるかに小さく、その優れた特性を発揮できていないのが現状です。

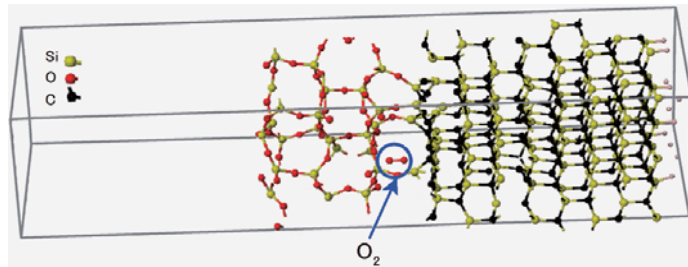


図1. 酸化過程のシミュレーションで用いた SiO₂/SiC 界面モデル

これらの特性を改善するためには、原子レベルで界面の構造と熱酸化の機構を明らかにすることが重要となります。SiC の熱酸化過程のシミュレーションにおいては、化学反応を伴うことと、界面においてさまざまな結合があることから経験的なパラメータを一切用いない第一原理計算が強力なツールとなりますが、計算量が膨大となるためにこれまで行われてきませんでした。地球シミュレータによる大規模な第一原理分子動力学計算により SiC の熱酸化過程のシミュレーションと SiC 熱酸化膜生成のシミュレーションを行いました。

利用成果

SiC 熱酸化のシミュレーションでは酸化温度を変えたシミュレーションを行うことにより、1500K と 2500K でどちらの場合でも酸化過程の途中において炭素クラスタが生成することと、炭素クラスタの形が異なることを見出しました。また酸化の進み方が 2500K では単層酸化となりますが 1500K では二層酸化となることがわかりました。アモルファス SiO₂/SiC 界面の生成シミュレーションにおいては、界面において欠陥構造を解消する生成条件を見出すことができ、良好なアモルファス SiO₂/SiC 界面を生成することに成功しました。

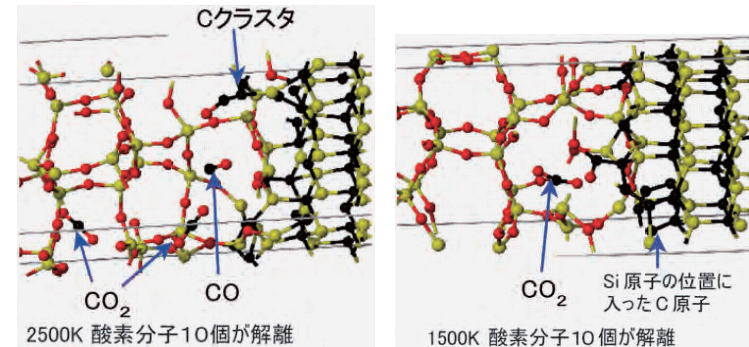


図2. SiC の酸化シミュレーション

(左: 2500K における 80 ピコ秒後、右: 1500K における 150 ピコ秒後のスナップショット)

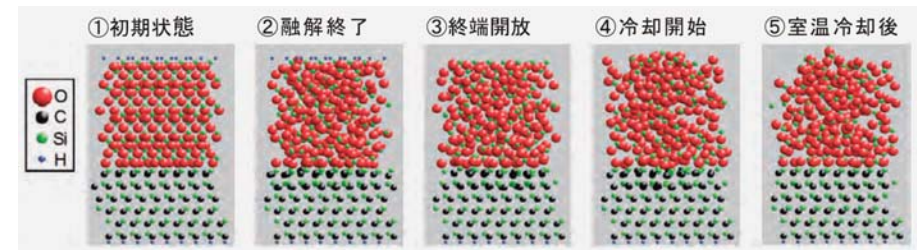


図3. アモルファス SiO₂/SiC 界面構造の生成シミュレーション