

RSPACE を用いた電子構造・輸送特性シミュレーション

阪大工、JST さきがけ、小野倫也

我々のグループでは、独自に密度汎関数理論に基づく第一原理計算コード RSPACE[1]を開発している。このコードは、実空間差分法に基づいた数値計算アルゴリズムを採用しており、超並列計算機での優れたパフォーマンスに加え、従来の平面波を用いた計算方法では取り扱えなかった伝導特性計算も可能であるという特徴を持つ。本プロジェクトでは、開発した RSPACE を駆使し、SiC パワーデバイスデバイスのデザインを行う。

SiC デバイスは、パワーデバイスのなかでも、熱酸化により SiO₂ という安定な絶縁膜が作成可能であるということと従来の Si デバイス作成技術を応用しやすいという利点をもつ。しかし、熱酸化時できた SiC/SiO₂ 界面の界面欠陥が原因と考えられるキャリア移動度の低下[2]やゲート電圧の閾値不安定性[3]が、量産化へ向け解決すべき課題となっている。ここでは、RSPACE を用いて大規模伝導特性計算を行い、MOS 界面のキャリア移動度を低下させるキラー欠陥の特定と滅処理方法の提案を目的としている。

昨年は、SiC 表面の初期酸化過程のシミュレーションを行い、SiO₂ 膜形成に余剰となった SiC 基板の C 原子が CO 分子として放出されること、そして分子放出により SiC と SiO₂ の格子定数の違いによる界面ひずみを緩和することを示した。今年は、SiC/SiO₂ 界面の酸化過程とキャリア散乱の原因となる界面欠陥の電子状態を調べるため、TEM 観察データやバンドオフセットを活用し、界面残留秩序構造の探索を行った。その結果、SiO₂ 相で tridymite および quartz 構造が混じった界面原子構造が有力であることが分かった。また電子状態計算により、界面欠陥は 2 つの SiO₂ 相が交わる部分で形成され、滅処理によって導入された N 原子によって容易に終端化されることが明らかになった。

発表では、欠陥を持った界面の電子状態と伝導特性計算を用いた欠陥の散乱特性の評価方法について議論したい。

文献

- [1] K. Hirose, T. Ono, Y. Fujimoto, and S. Tsukamoto, First-Principles Calculations in Real-Space Formalism, Electronic Configurations and Transport Properties of Nanostructures (Imperial College, London, 2005).
- [2] D. Okamoto, H. Yano, K. Hirata, T. Hatayama, and T. Fuyuki, IEEE Electron Device Letters **31**, 710 (2010).
- [3] M.J. Marinella, D.K. Schroder, T. Isaacs-Smith, A.C. Ahyi, J.R. Williams, G.Y. Chung, J.W. Wan and M.J. Loboda, Appl. Phys. Lett. **90**, 253508 (2007).