

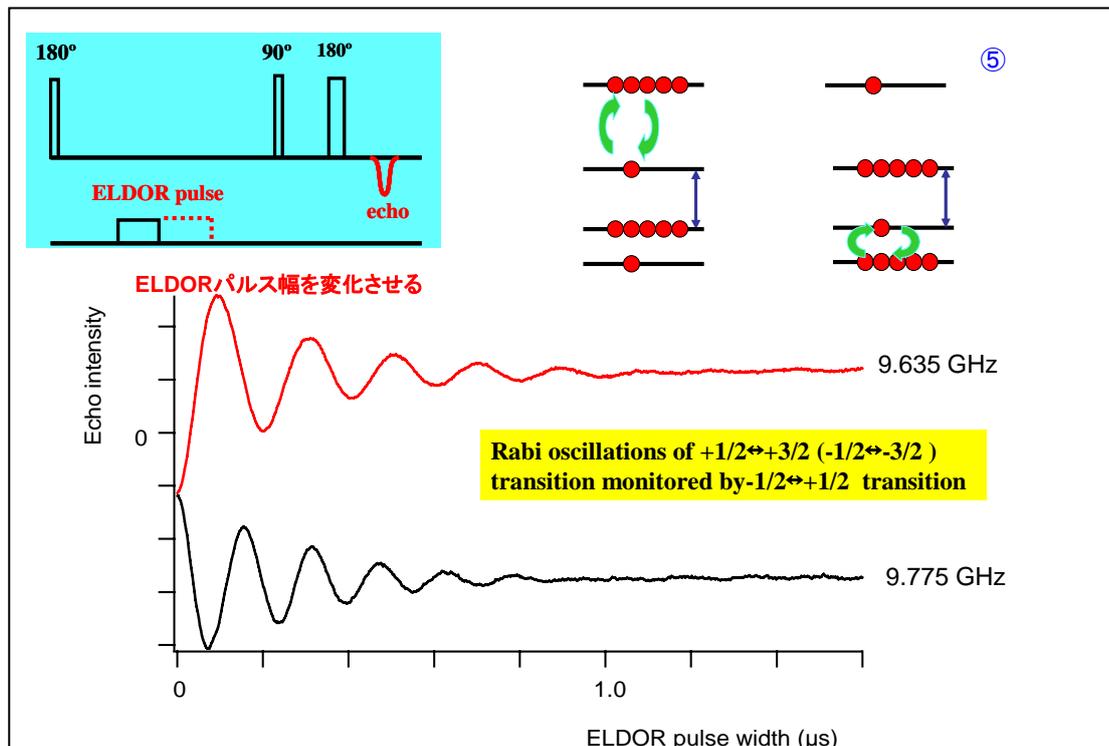
平成20年度図書館情報メディア研究科プロジェクト研究 研究成果報告書

種 目	プロジェクト研究	外部資金	研究代表者 氏 名	磯 谷 順 一
研究課題	地球に優しいユビキタス情報環境推進の材料評価 Characterization of ICT device materials necessary to develop ubiquitous information environment friendly to earth			
研究組織（研究代表者及び研究分担者）				
氏 名	所属研究機関・部局・職	現在の専門	役割分担	
磯谷 順一	図書館情報メディア研究科・教授	材料科学	研究統括・高分解能測定	
梅田 享英	図書館情報メディア研究科・准教授	半導体エレクトロニクス	実験・データ解析	
水落 憲和	図書館情報メディア研究科・講師	応用物理・量子情報	実験・データ解析	
研究目的				
<p>情報技術の革新的な進歩のステップは新半導体材料によるデバイスの導入によってもたらされている。ブロードバンド化・ユビキタス化の進展にあたり、高速化においてシリコンの性能を上回るばかりでなく、低消費電力化・軽量化の実現が新半導体材料に求められる重要なファクターになっている。とりわけパソコン・携帯電話がグローバルに、爆発的に普及するばかりでなく、自動車・家電をはじめとするあらゆる機器に多くのコンピュータが組み込まれる状況になってくると、コンピュータが使用する電力量も莫大に増加してくる。人類の持続的な発展をめざして知識と情報を効率よく効果的に利用する環境を進化させていくこと自体が、エネルギー消費の点でサステナビリティを侵しかねない。</p> <p>炭化ケイ素（SiC）は単に高速特性・対高温特性（冷却が簡便）・低消費電力において優れているばかりでなく、低損失のパワーデバイス（様々な電源の基幹部品となるデバイス）として、地球に優しいデバイス材料として脚光を浴びている。半導体デバイスの特性は数十万分の一程度の微量の欠陥や不純物によって大きく損なわれてしまう。SiCにおいては、シリコンが60年代から70年代に乗り越えた欠陥・不純物の制御の課題にまだ当面しており、期待される性能を持った実用的なデバイスの開発が遅れてしまっている。この課題の解決には、欠陥・不純物の正体を明らかにすることが不可欠である。本研究は、SiC デバイスの実用化を妨げている欠陥・不純物の低減という課題を解決し、シリコンでは得られない特性を持ち、かつ、エネルギー消費の低いデバイスの開発に貢献することにより、地球に優しい高度な情報環境の推進に寄与することを目的とする</p>				
研究成果				
<p>シリコン半導体デバイスを SiC 半導体デバイスで置き換えることは、低損失電力素子として省エネ効果をもたらし、二酸化炭素増加による地球温暖化に対して確実な対応策のひとつとなる。省エネ効果は基幹系電力分野での応用において著しいが、冷蔵庫・エアコンのインバータをシリコンから SiC に置き換えることによっても家庭内消費電力の4%の省エネが期待される。また、CPUの動作周波数向上に伴う CPU 電源のスイッチング素子の高速化や電気自動車用のインバータの高出力化・高効率化などには、シリコンでは得られない性能をもつ SiC デバイスが緊急の課題として迫ってきている。あらゆる場面で様々な形でコンピュータが使われる高度なユビキタス情報環境は、地球環境との両立が条件であり、情報機器の省エネ・小型化・軽量化をもたらす SiC 半導体デバイスの実用化が急務であ</p>				

る。このような期待がされている、SiC 半導体デバイスの実用化を阻んでいるのは、不純物・欠陥の存在のために、SiC 本来の物性から期待される性能がデバイスに発揮されないことにある。そこで我々は、高分解能パルス ESR、高感度 EOMR 法を含む電子スピン共鳴(EPR)法で不純物・欠陥をマイクロなレベルで同定し、その正体を明らかにしてきている。

(1) 我々は、電子スピン共鳴(EPR)法を用い、電子線照射により生成した単空孔、複空孔、アンチサイト空孔対など空孔型欠陥の構造を詳細に同定してきた。これらをまとめ、異なる欠陥における電子の局在度、構造緩和の違いを体系的に比較した論文を発表した。(論文(3))

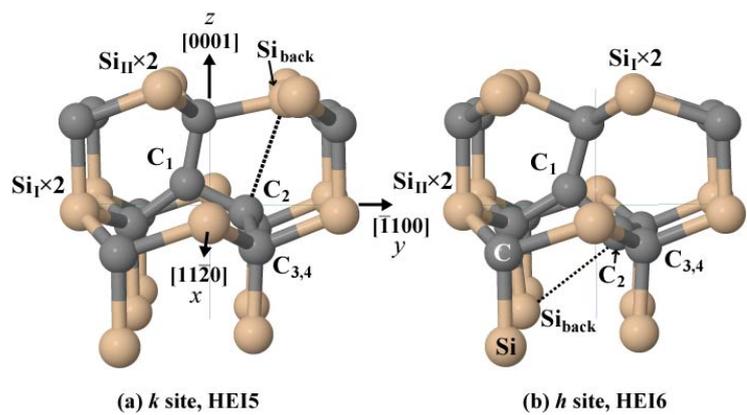
また、スピンを量子ビットに用いる量子情報処理への応用の第1歩は任意の「重ね合わせ」ができることを示す「ラビ振動」の実験である。本論文においては、 $S=3/2$ 系にの $M_S = \pm 3/2 \leftrightarrow \pm 1/2$ の遷移の「ラビ振動」を $M_S = +1/2 \leftrightarrow M_S = -1/2$ のシグナルでモニターするというパルス ELDOR (Electron Electron Double Resonance) の実験を世界で初めて行い、 T_{v2a} と呼ばれ欠陥の $M_S = +1/2 \leftrightarrow M_S = -1/2$ のシグナル (この遷移は今まで他の欠陥のシグナルに隠れており、光照射による T_{v2a} センターの分極においても $\pm 1/2$ 準位が選択的にほぼ同じ占有数で占められるので、従来はシグナル増幅が得られなかった) を初めて観測した。(論文(3), 論文(4-1))



(2) SiC 半導体デバイスの実用化においては、イオン注入後の高温アニール後にも欠陥が残存することが問題になっているが、はっきりした正体がつかめられていなかった。我々は、電子線照射を様々な温度 ($-260^\circ\text{C} \sim 800^\circ\text{C}$) で行い、原子空孔・格子間原子の拡散・凝集に基づく欠陥の生成・変化の過程を明らかにするとともに、高温で残存する欠陥の同定を試みている。

理論的には格子間型欠陥も熱的に極めて安定な形を取りうることに指摘されており、特に格子間炭素とその凝集体が注目されている。実際、フォトルミネッセンス (PL) 法で見られる 1500°C 以上でも安定な欠陥や、DLTS 法で見られる有名な $Z_{1/2}$ 欠陥 (1500°C 以上でも安定) は格子間炭素の凝集体ではないかと言われている。そこで、我々もこれまでに電子線照射やイオン照射を行ってきた 4H-SiC 試料を再検討し、格子間炭素が含まれていないかどうかを注意深く調べてみた。その結果、SiC 中での格子間炭素の基本形態の1つ、dicarbon antisite (C_2)_{Si} (2つの炭素原子がシリコン原子1個を置き換えたも

この欠陥は「HEI5/6センター」と名付けられ、 k サイトにあるものが HEI5、 h サイトにあるものが HEI6で、図のような構造をもっている。SiC 中の格子間炭素の基本形態は dicarbon であり、ここでは C_1 - C_2 と名付けられた dicarbon が Si サイトに収まり、 sp^2 混成軌道で周囲の炭素と強い結合を作っている。 C_1 原子上には $[1120]$ 方向を向いた炭素 π 軌道が発生しており、この軌道から発生する大きな ^{13}C 超微細分裂が HEI5/6 センターの EPR スペクトルの特徴となっている。



第一原理計算で求められた 4H-SiC 中の $(C_2)_{\text{Si}}$ 欠陥の構造

他方、 C_2 原子上にも 2 電子占有の炭素 π 軌道があり、 C_1 原子の対電子 π 軌道との電子間反発を最小にするように上手くねじれて、 k/h サイトでそれぞれ違う Si 原子 (Si_{back}) との間に弱結合を作っている。そのため、 k/h サイトで C_1 - C_2 の傾き方が違うなどの原子構造の違いが発生し、EPR スペクトル上で両者を区別することができる結果となっている。

この欠陥がどのような照射条件下で発生しているのかを調べたところ、 n 型結晶ではほぼ必ず発生している普遍的な欠陥であることが分かった。しかも照射の最も初期段階で発生する欠陥であることも分かった。欠陥の発生しやすさは生成エネルギーで比較できるが、最も発生し易いのが炭素アンチサイト (C_{Si}) で 3.4 eV、2 番目が炭素空孔 (V_{C}) で 4.0-4.2 eV、 $(C_2)_{\text{Si}}$ は 7.8 eV とあり、通常では V_{C} よりも速く発生するということはある得ない。しかし仮に照射前の結晶中に C_{Si} ($(C_2)_{\text{Si}}$ の前駆体) が分布していれば上記の 7.8 eV は 3-4 eV まで下がる。したがって、私達の結果は as-grown の SiC ウェハに C_{Si} が発生していることを示している。ちなみに C_{Si} はバンドギャップ中にエネルギー準位をもたない不活性な欠陥のため観察することはできないが、理論計算はこの欠陥が as-grown ウェハでも大量に発生し、後のプロセスで他の欠陥の前駆体になることを警告している。

また、 $(C_2)_{\text{Si}}$ のアニール特性を調べたところ、1000°C で消失し始めることが分かった。この温度で格子間炭素は移動を開始し、その結果、共存する V_{C} と再結合したり、より大きな炭素凝集体へと成長しているものと考えられる。(論文(1), 4-3)

(3) SiO_2/SiC 界面欠陥の EDMR(電流検出 EPR)

炭化ケイ素 (SiC) を用いることにより、高速化と低消費電力化においてシリコンの特性を上回る MOSFET の開発が期待されている。ところが、 SiO_2/SiC 界面に存在する界面欠陥のために、炭化ケイ素本来の特性(チャンネル移動度)が発揮されずいる。したがって、界面欠陥の正体(原子レベルの構造)を明らかにすることが、低損失のパワーエレクトロニクス素子の実用化によりエネルギー消費を下げるための緊急の課題となっている。EDMR(電流的検出 EPR)法は、EPR を電流の変化として検出する方法で、試料の微細な領域を対象に、高感度の検出ができることに加えて、デバイス形状のままの測定ができる点において、通常の EPR 法にない特長をもつ。界面欠陥の低減のために酸化膜に水素添加と窒素添加を行った SiC-MOSFET を EDMR 法で評価した。ガンマ線照射により界面欠陥を観測す

るとともに、窒素添加が界面欠陥の低減に有効であることがマイクロなレベルで明らかになった。(論文 4-2)

(4) 低温電子線照射した 3C-SiC 中の Frenkel 対の同定

低温電子線照射し、冷却したまま EPR 測定用クライオスタットに移すことによって、室温では不安定な格子間原子と原子空孔のペアの EPR スペクトルを観測することに成功した。

代表的な研究発表・特許等の成果一覧、特記事項等

(1) “Dicarbon antisite defects in *n*-type 4H-SiC”
Physical Review B 79, 115211 (8 pages) (2009).

(2) 以下の査読付国際会議論文は、International Conference on Silicon Carbide and Related Materials 2007 (Otsu, Japan, Oct.14-19, 2007) の Proceedings (Trans Tech Publications,2009)及び雑誌 Materials Science Forum に発表されたものである。

2-1.T. Umeda, N. Morishita, T. Ohshima, H. Itoh, J. Isoya
”Photo-EPR study of vacancy-type Defects in irradiated *n*-type 4H-SiC”
Materials Science Forum 600-603, 409-412 (2009).

2-2.J. Isoya, T. Umeda, N. Mizuochi, N.T. Son, E. Janzén, T. Ohshima (invited)
“EPR identification of defects and impurities in SiC: To be decisive”
Materials Science Forum 600-603, 279-284 (2009).

(3) 以下のものは、Special issue の招待論文として掲載された(査読付)
J. Isoya, T. Umeda, N. Mizuochi, N.T. Son, E. Janzén, T. Ohshima
“EPR identification of intrinsic defects in SiC”
phys. stat. sol. (b) 245, 1298-1314 (2008).

(4) 以下の European Conference on Silicon Carbide and Related Materials (Barcelona, Spain, Sept.7-11, 2008)の発表は、Proceedings (Trans Tech Publications, 2009)に受理(査読付国際会議論文)され、雑誌 Materials Science Forum に掲載された。

4-1. J. Isoya, T. Umeda, N. Mizuochi, T. Ohshima
“Pulsed EPR studies of the Tv2a center in 4H-SiC”
Materials Science Forum 615-617 (2009) 353-356

4-2. A. Gali, T. Umeda, E. Janzen, N. Morishita, T. Ohshima, J. Isoya,
“Identification of the di-carbon antisite defect in *n*-type 4H-SiC”
Materials Science Forum 615-617 (2009) 361-364

4-3. P. Carlsson, N.T. Son, J. Isoya, N. Morishita, T. Ohshima, H. Itoh, E. Janzén, “Photo-EPR studies on low-energy electron-irradiated 4H-SiC”
Materials Science Forum 615-617 (2009) 401-404

4-4. N. T. Son, J. Isoya, N. Morishita, T. Ohshima, H. Itoh, A. Gali, and E. Janzen, “Defects introduced by electron-irradiation at low temperatures in SiC”
ated 4H-SiC”
Materials Science Forum 615-617 (2009) 377-380

(5) T. Umeda, S. Hagiwara, N. Mizuohci, J. Isoya
情報管理 51, 653-666 (2008).

“特定分野の学術論文をピンポイントで抽出し、いかに検索するか? ~ Defect dat@base の実践例”
 (“A pinpoint search system for a specialized research area in physics and engineering
– Defect dat@base for defects in semiconductors and semiconductor devices”)