

分光エリプソメトリによる SiC 半導体の酸化界面評価と 酸化メカニズム解明

Characterization of oxidizing interface and elucidation of oxidation mechanism of SiC semiconductor using spectroscopic ellipsometry

土方泰斗*, 矢口裕之*, 吉田貞史**

Yasuto HIJIKATA, Hiroyuki YAGUCHI, and Sadafumi YOSHIDA

We tried to elucidate the oxidizing interface structure of SiC semiconductor and its oxidation mechanism. First of all, we investigated the analysis method for deriving the thickness of interface layer and verified the validity of the method by analyzing the multi-angle measurement data. As a result of analysis for SiC-oxide interfaces using the analysis method, it is found that the photon energy dispersion of optical constants of the interface layer is similar to that for SiC, the real part of dielectric function is larger than that of SiC, and the imaginary part agrees with that of SiC. In addition, we examined the thickness dependence of optical constants of interface layer and found that the standing point in energy dispersion of the imaginary part of dielectric function shifted to the lower energy-side at 40 nm of oxide thickness. In addition to the observation of SiC-oxide interface, real-time measurements of oxide growth-rates of SiC at various oxidation temperatures were conducted using an *in-situ* spectroscopic ellipsometer. We tried to apply ‘Si and C emission model’, which is proposed as the SiC oxidation model by us, to the experimental growth-rate data. As a result, the Si and C emission model well reproduced the growth-rate at the entire oxide thickness region at all of the oxidation temperatures measured for both of (0001)Si-face and (000-1)C-face. Based on the knowledge on oxidizing interface layer and oxidation mechanism obtained from spectroscopic ellipsometry studies, we discuss the structure of interface layer and the formation mechanism of interface states.

Keywords: Silicon carbide, oxidation, MOSFET, Spectroscopic ellipsometry, Oxidizing interface

*埼玉大学 大学院理工学研究科 数理電子情報部門
Division of mathematics electronics and informatics,
Graduate school of science and engineering, Saitama
University, 255 Shimo-Okubo, Sakura-ku, Saitama,
Saitama, 338-8570, Japan

**産業技術総合研究所 第2事業部 先進パワーエレクトロニクス研究センター
Advanced power electronics research center, National
Institute of Advanced Industrial Science and Technology
Tsukuba Central 2, 1-1-1 Umezono, Tsukuba-shi, Ibaraki
305-8568, Japan
(原稿受付日: 平成 22 年5月31日)

分光エリプソメータを用いて、SiC 半導体の酸化界面構造と、酸化メカニズムの解明を試みた。まず、界面層膜厚を正確に求めるための解析手法を検討し、多入射角測定に対する解析結果によってその妥当性を検証した。本解析手法を用いて SiC/酸化膜界面を観察した結果、界面層の光学定数のエネルギー分散形は SiC のそれと同様であり、誘電関数実部がやや SiC より大きく、虚部が SiC と一致することが明らかにされた。また、界面層光学定数の酸化膜厚依存性を調べたところ、厚さ約 40 nm において誘電関数虚部の立ち上がりが低エ

エネルギー側にシフトした。また、*In-situ* 分光エリプソメータを用いて SiC の酸化膜成長速度を様々な酸化温度に対して実時間測定した。得られた成長速度データに対し、SiC の酸化モデルとして筆者らが提案した“Si および C 原子放出モデル”の適用を試みた結果、Si 面、C 面共に全ての酸化温度における全膜厚領域の酸化膜成長速度データを再現した。以上の酸化界面層や酸化メカニズムに関する知見を基に、界面構造や界面準位発生のメカニズムを考察した。

1.はじめに

SiC は Si に比べてバンドギャップが約 3 倍で、絶縁破壊電界が約一桁大きい、飽和ドリフト速度が約 3 倍といったパワーデバイスとしての優れた物性を有することから、SiC パワーデバイスは Si 素子の性能限界を超える素子として期待されている。また、Si と同様の熱酸化により SiC 表面に絶縁膜である SiO₂ を得ることができることから、現在 SiC-MOSFET の実用化研究が盛んに行われている。しかし、SiC の物性値から予測される低いオン抵抗は得られておらず、その原因として SiC/酸化膜界面近傍の反転層におけるチャネル移動度が小さいことが挙げられている。また、チャネル移動度低下の原因は、SiC/酸化膜界面の界面準位密度が高いこと等が候補として考えられており、界面構造の詳細を明らかにすることは良好な MOS 特性を得る上での重要課題と言える。さらに、SiC の酸化メカニズムを明らかにすることはこれらの問題解決の有力な手がかりと成り得るが、SiC の酸化メカニズムは Si のそれと比べ良くわかっていない。

筆者らは、過去に行った *Ex-situ* 分光エリプソメータによる SiC/酸化膜界面の観察実験によって、界面には厚さ 1 nm 程度で屈折率が SiO₂ や SiC よりも高い層が存在することを明らかにした¹⁾。また、その界面層の屈折率は、*C-V* 測定から得た界面準位密度の値と良く対応することがわかった²⁾。ところが、界面層の光学定数の解析結果は界面層の膜厚に強く依存するが、従来の解析方法では解析を収束させるためにその膜厚を

1 nm に固定していた。本報告では、界面層膜厚を 1 nm に固定しない解析方法の検討と、その方法によって得られた界面層光学定数の酸化膜厚依存性について紹介する³⁾。

一方、筆者らは *Ex-situ* 分光エリプソメータによる界面観察実験と平行して、*In-situ* 分光エリプソメータを用いて SiC の酸化の様子をその場観察することにも試みてきた。その結果、酸化初期に酸化速度増速過程が存在することを世界で初めて明らかにした⁴⁾。また、Si の酸化モデルである“界面 Si 原子放出モデル⁵⁾”を SiC 向けに改良した、“Si および C 原子放出モデル”を提案し、このモデルが初期増速過程を含む、全膜厚領域における酸化膜成長速度データを良く再現できることを示した⁶⁾。さらに、本モデルは Si 面と C 面のいずれに対しても適用可能であることを示した。本報告では、Si および C 原子放出モデルを様々な酸化温度における酸化膜成長速度に適用することを試み、本モデルの妥当性を検証した⁷⁾。

2.実験結果と考察

4H-SiC 基板(0001)Si 面に dry 酸化を施した試料を、分光エリプソメータを用いて(Ψ , Δ)の光子エネルギー依存を測定した。測定エネルギー範囲は 2.0–6.0 eV、入射角度は 75° で測定した。カーブフィッティングにおける測定誤差の影響を抑制し、より正確に酸化膜の構造を解析するため、測定間隔は従来の 0.1 eV 間隔から 0.01 eV 間隔に縮小した。酸化膜の構造は SiO₂/界面層/SiC の三層構造を仮定し、界面層の光学定数(n , k)のエネルギー分散式をいくつか検討した。その結果、次のような解析方法に帰着した: 界面層の k がわずかにある 2.5–5.0 eV の範囲で、界面層の光学定数は吸収を考慮したセルマイヤーの波長分散式に従うと仮定し、測定値(Ψ , Δ)に対してカーブフィッティングを行い、SiO₂ の膜厚 d_1 と界面層の膜厚 d_2 、セルマイヤーの波長分散式のパラメータを同時に決定する。次に、2.5–5.0 eV の範囲で得られた d_1 , d_2 の値を用いて、2.0–6.0 eV の範囲で界面層の(n , k)を各エネルギーで

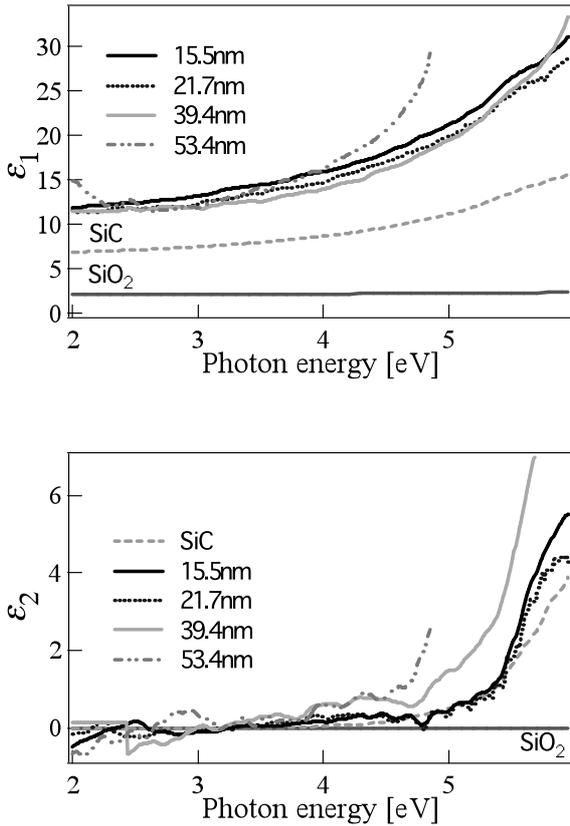


Fig. 1. Oxide thickness dependencies of dielectric functions of SiC-oxide interface layer on (0001)Si-faces.

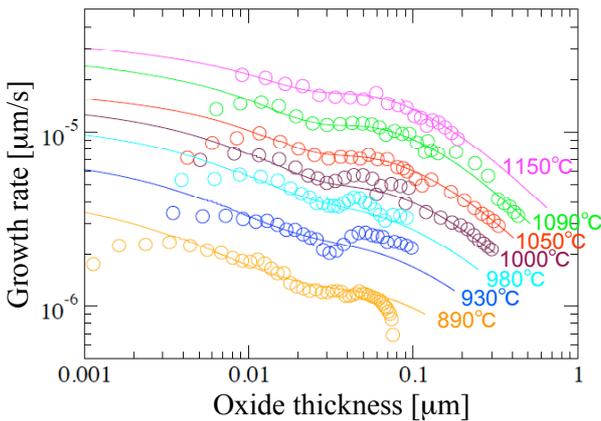


Fig. 2. Experimental data and calculated values of oxide thickness dependencies of oxide growth-rates on (000-1)C-faces.

求める。このような解析方法を用いると、界面層膜厚の誤差が 1/10 程度に抑えられることが分かった。次に、試料入射光の入射角度を 70, 72.5, 75° と変化させ、いずれの入射角でも界面層の厚さ・誘電率の解析結果が等しくなることを確認し、使用した誘電関数モデルおよび膜構造モデルが妥当であることを確認した。

上述の解析法を用いて SiC-Si 面の界面層誘電関数の酸化膜厚依存性を調べた結果を Fig.1 に示す。図より、酸化膜厚の薄い場合では、誘電関数実部 ϵ_1 、虚部 ϵ_2 が共に SiC のエネルギー分散形と等しく、 ϵ_1 が SiC よりも絶対値が 5~10 大きく、 ϵ_2 は絶対値も SiC と一致することが明らかになった。これらの実験結果から、界面層は、酸化界面付近の SiC 側に位置する、SiC が変成した層であると考えられる。また、酸化膜厚がおよそ 40 nm を超えると、 ϵ_2 の 5 eV 付近における立ち上がりのエネルギーが低エネルギー側へシフトした。このことは、界面付近 SiC 側に積層欠陥が発生し、それによって形成される禁制帯内準位が 40 nm を超えると伝導帯端と結合し、見かけ上バンドギャップが小さくなったことに起因すると考えられる。

Fig.2 に、*In-situ* 分光エリプソメータによって測定された、様々な酸化温度における C 面酸化膜成長速度の膜厚依存の実測値 (○) と Si 及び C 原子放出モデルによる計算値 (実線) を示す。図より、Si および C 原子放出モデルは、どの酸化温度においても成長速度データを全膜厚領域において忠実に再現していることがわかる。なお、Si 面に対しても同様に、全ての測定温度に対する酸化膜成長速度が忠実に再現された。

以上の実験結果を総合的に解釈すると、界面層の構造は以下のように考えられる。まず、Si および C 原子放出モデルに基づく Si, C 原子放出が、酸化膜側だけでなく SiC 側にも起きていると考える。酸化膜厚の薄いと、放出原子の濃度は SiC の電子構造を変える程高くないが、原子密度は SiC より高いので、 ϵ_1 は全エネルギーに亘って上昇し、 ϵ_2 はあまり変化しないと考えられる。しかし、酸化膜厚の増加に伴い、放出原子がより深く SiC 層内を拡散するため、SiC 層内には格子間型積層欠陥(いわゆる Frank 転位ループ⁸⁾)が発生し、その密

度が増加してついには(積層)欠陥準位とSiCの伝導帯端とが結合し、吸収端が見かけ上低エネルギー側へとシフトする。

Si 酸化の研究においては、古くから Si 層側への Si 原子放出が実験的に確かめられており、Si 層での酸化誘因積層欠陥(Oxide-induced Stacking Fault: OSF)の発生に起因すると考えられてきた⁹⁾。また、as-grown のSiCホモエピ膜には深い準位を形成するC空乏が存在するが、その点欠陥の密度は酸化によって大幅に低減化されるとの報告がある¹⁰⁾。その報告によれば、酸化中にC原子がSiC層に放出されてC空乏を埋めるために欠陥準位が低下すると考察されている。さらに、Zhelevaらが行った高分解能TEM観察の結果によると、酸化膜/SiC界面のSiC側には高濃度のC原子を含むSiCの層があるとされている¹¹⁾。以上のことから、酸化中にSiC側へSi and/or C原子が放出し、格子間原子を含む界面層を形成している可能性が高いと考えられる。また、SiC-MOSFETのチャネル移動度の低下に起因すると言われる伝導帯付近の界面準位は、このような格子間原子を含む界面層が起源であることが*ab-initio*計算による予測から明らかにされている^{12,13)}。さらに、高濃度C原子を含む界面層の厚さが、MOSFETのチャネル移動度と相関があるとの実験結果もある¹⁴⁾。従って、今回考察された格子間原子を含む界面層が、MOS界面特性の低下に強く関与していることが疑われる。

3.まとめ

Ex-situ 分光エリプソメータを用いて4H-SiCの酸化界面を調べ、界面構造はSiCが変成した層で構成されていることを示唆する実験結果を得た。また、界面層光学定数の酸化膜厚依存性から、界面層は格子間原子によって形成された積層欠陥を含む層であることが示唆された。*In-situ* 分光エリプソメータによって測定された様々な酸化温度における酸化速度データに対し、SiおよびC原子放出モデルの適用を試み、本モデルは全て

の測定酸化温度に対して全酸化膜厚領域における酸化速度データを再現することがわかった。SiおよびC原子放出モデルに基づき界面構造と界面準位発生のメカニズムを考察し、酸化中のSiおよびC原子のSiC層側への放出によってMOS界面に関する様々な実験的知見を矛盾無く説明できることを示した。

今後は、同位体SiCエピ膜の酸化と同位体追跡によって更に詳しく酸化メカニズムを解明することや、界面構造シミュレーションを利用して最適酸化条件を導き出すこと等を行っていきたいと考えている。

参考文献

- 1) T. Iida, Y. Tomioka, K. Yoshimoto, M. Midorikawa, H. Tukada, Y. Hijikata, M. Orihara, H. Yaguchi, M. Yoshikawa, Y. Ishida, and S. Yoshida: Jpn. J. Appl. Phys. **41**, 800 (2002).
- 2) H. Hashimoto, Y. Hijikata, H. Yaguchi and S. Yoshida: Appl. Surf. Sci. **255**, 8648 (2009).
- 3) H. Seki, T. Wakabayashi, Y. Hijikata, H. Yaguchi and S. Yoshida: Mater. Sci. Forum **615-617**, 505 (2009).
- 4) T. Yamamoto, Y. Hijikata, H. Yaguchi, and S. Yoshida: Jpn. J. Appl. Phys. **47**, 7803 (2008).
- 5) M. Uematsu, H. Kageshima, and K. Shiraishi: J. Appl. Phys. **89**, 1948 (2001).
- 6) Y. Hijikata, H. Yaguchi and S. Yoshida: Appl. Phys. Express **2**, 021203 (2009).
- 7) Y. Hijikata, H. Yaguchi and S. Yoshida: Mater. Sci. Forum **645-648**, 809 (2010).
- 8) 例えば、河東田隆編著：半導体評価技術（第9版）産業図書, p.201 (1989).
- 9) K. Taniguchi, Y. Shibata, C. Hamaguchi: J. Appl. Phys. **65**, 2723 (1989).
- 10) T. Hiyoshi and T. Kimoto: Appl. Phys. Express **2**, 091101 (2009).
- 11) T. Zheleva, A. Lelis, G. Duscher, F. Liu, I. Levin,

- and M. Das: Appl. Phys. Lett. **93**, 022108 (2008).
- 12) J.M. Knaup *et al.*: Phys. Rev. B **71** 235321 (2005).
- 13) F. Devynck and A. Pasquarello: Physica B **401-402** 556 (2007).
- 14) T. L. Biggerstaff *et al.*: Appl. Phys. Lett. **95** 032108 (2009).