

## 研究成果最適展開支援事業 (A-STEP) FS ステージ (シーズ顕在化) 事後評価報告書

プロジェクトリーダー (企業責任者) : アドバンスソフト (株)

研究責任者 : (独) 物質・材料研究機構 大野 隆央

研究開発課題名 : パワーデバイス用 SiC 結晶の原子スケール成長シミュレーターの開発

### 1. 研究開発の目的

シリコン基板上で Si 化合物半導体の薄膜成長過程をシミュレーションする現行ソフトウェアは、周期構造の一部に積層欠陥を含む SiC には適用できない。本技術は、モンテカルロ法の高速計算の利点を損なうことなく、欠陥を含む SiC 結晶の成長過程を原子スケールで高速シミュレーションすることを可能にし、高品質な SiC 結晶を作製するためのプロセス・シミュレーターの基礎となるようなソフトウェアを開発することを目的とする。SiC には 2H-SiC, 3C-SiC, 4H-SiC などの積層秩序に依存した準安定構造が存在するとともに、秩序の乱れによる積層欠陥が多数混入する。これらの成長プロセスを制御できる本技術を高品質の SiC 結晶の製造技術の確立に資することで、SiC をベースとしたパワーデバイスの実用化とその国際競争力の向上に貢献することが期待できる。

### 2. 研究開発の概要

#### ①成果

SiC の結晶構造形成シミュレーターに関し、2H-SiC, 3C-SiC, 4H-SiC などの SiC の多相構造と Si ダイヤモンド構造を入力ファイル内で指定することにより、初期構造としてこれらを組み合わせた積層構造を簡単に生成できるルーチンを作成し、大規模系の解析を可能にした。積層欠陥の解析を可能とするため、運動学的モンテカルロ法をベースに結晶格子の周りにサブメッシュを生成する方法を導入した。また、SiC の固相成長を、100nm 四方の面積で 50 原子層の膜厚を持つ試料に対し、現実的時間スケールで解析できるシミュレーターを開発することを目標に、繰り返しの多いポテンシャル計算部分のテーブル化と並列化チューニングを行うことにより、1 週間程度で高速実行できることを検証した。今後は、気相成長への展開を図っていく。

#### ②今後の展開

今後の展開の一つは、界面の凹凸を考慮したシミュレーションが行えるように、さらなる高速化を進めることである。もう一つの展開は、産業応用の立場からは固相成長より気相成長解析に対する期待が大きいことから、気相成長に拡張、展開することである。

### 3. 総合所見

概ね期待通りの成果が得られ、イノベーション創出が期待される。

SiC 固相成長について 500 万原子系のシミュレーションを現実的な時間で可能にするなど、材料シミュレーション技術に進展があったと判断される。SiC 結晶の高品質化を達成するにはまだ課題はあるが、本技術は材料設計に資するための現実的な手法であり、今後の展開次第では国際競争力の向上につながる科学的成果が期待できる。