

論文審査の結果の要旨および担当者

報告番号	※ 甲 第 12311 号
------	---------------

氏 名 白川 裕規

論 文 題 目

第一原理計算による次世代半導体素子の設計指針
(First-Principles Atomistic Study for the Next Generation
Semiconductor Devices)

論文審査担当者

主査	名古屋大学	教授	白石 賢二
委員	名古屋大学	教授	中塚 理
委員	名古屋大学	准教授	牧原 克典
委員	名古屋大学	准教授	芳松 克則

論文審査の結果の要旨

白川裕規君提出の論文「第一原理計算による次世代半導体素子の設計指針」は、第一原理計算によって半導体素子の動作機構・劣化機構を理論的に明らかにしている。各章の概要は以下の通りである。

第1章では、半導体素子の歴史と基本原理、そして現在の問題点を言及している。具体的にはSiCパワーデバイスの問題点、不揮発性メモリの問題点と解決すべき課題について詳しく述べている。

第2章では、本博士論文で用いる計算手法について詳細に説明している。ボルン・オッペンハイマー近似に始まって密度汎関数法の基本原理からKohn-Sham方程式の導出、さらに本研究で用いる擬ポテンシャル法から電気伝導計算に用いる非平衡グリーン関数法について述べている。

第3章では、SiC-MOSFETにおける負バイアス温度不安定性の原子レベルの起源の解明について議論している。SiCを熱酸化して得られるSiO₂絶縁膜中には炭素不純物が含まれ、それが疑似炭酸イオンCO₃として存在することが海老原らによって報告されている。疑似炭酸イオンに水素原子が付加されると水素原子はプロトンとなってCO₃-Hという形態の複合不純物となることを明らかにした。またCO₃に付加されたプロトンはSiO₂中をバイアス印加と200°C程度の温度下で可動イオンとしてSiO₂中を拡散することを見出した。この結果はこれまで全く理解されていなかったSiC-MOSFETにおける負バイアス温度不安定性の起源を世界ではじめて解明したものである。

第4章では、MONOS型メモリの長期保存メモリ利用の可能性について議論している。SiO₂/SiN/SiO₂という積層構造からなるMONOS型メモリは現在のフラッシュメモリとして用いられており繰り返し書き換え耐性があることが知られている。書き換え耐性に優れたMONOSメモリを作るにはSiN中の窒素空孔を電子トラップとして用いることがよいことが報告されている。それに対し酸素原子型欠陥は書き換え耐性に優れないため、取り除くことが一般的になっている。本章では、長期保存メモリにMONOS型メモリを用いるには通常は使用されない酸素原子欠陥を積極的に利用することによって書き換え耐性には優れないが寿命は1000年以上にも及ぶ理想的な性能を発揮することを予言した。

第5章では、MONOS型メモリ特有の不可逆的な閾値電圧シフトの物理的起源について議論している。通常のフローティングゲート型メモリではバイアス印加によってSi/SiO₂界面のSi-Hボンドから水素がはずれることによって閾値変動が起こるがバイアスを切ると水素がSi/SiO₂界面に戻るため閾値シフトは可逆的である。これに対しMONOS型メモリにおいてはバイアス印加を切っても閾値シフトが戻らないことが知られている。本章ではアモルファスSiO₂中のN原子は(NO)₂Vo欠陥を形成し、この複合欠陥に水素原子がトラップされることをまず明らかにした。また、(NO)₂VoH欠陥は非常に安定でこの複合欠陥が形成されると水素原子は元のSi/SiO₂界面に戻れなくなることを明らかにすると同時にこの(NO)₂VoH欠陥はバイアス印加によってはじめて形成されることを見出した。これらの結果はMONOS型メモリにおいてはSiO₂中に取り込まれたN原子の影響で不可逆的な閾値電圧シフトが起こることを意味する。このように白川氏はMONOS型メモリ特有の不可逆的な閾値電圧シフトの物理的起源を世界ではじめて解明した。

第6章では、iPCMのスイッチング機構を世界ではじめて解明した。ジュール熱によってiPCMは高抵抗状態から低抵抗状態になるのに対し、ジュール熱と正孔注入によって低抵抗状態から高抵抗状態になることを第一原理分子動力学計算の詳細な計算によって明らかにした。

第7章では、本研究の結論を与えている。

以上のように本論文では第一原理計算を用いて半導体素子の動作機構・劣化機構を明らかにするとともにこれらの性能を向上させるための指針も示している。これらの第一原理計算によって得られた結果は、パワーデバイスの信頼性や新規不揮発性メモリの動作機構・劣化機構に対して新たな視点を与えている。得られた結果はこれらの半導体素子を実用化するために重要な知見であり、工学の発展に寄与するところが大きいと判断できる。よって、本論文の提出者である白川裕規君は博士（工学）の学位を受けるに十分な資格があると判断した。