4H-SiC(0001)/SiO2 界面での欠陥準位の分布の第一原理解析

First-principles analysis on defect level distribution at 4H-SiC(0001)/SiO2

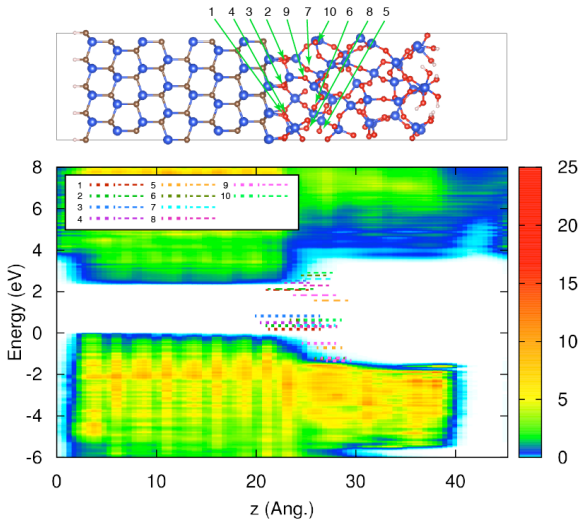
○金子智昭[1,2]，山崎隆浩[1,2]，田島暢夫[1,2,3]，奈良純[1,2]，清水達雄[4]，
加藤弘一[3]，大野隆央[1,2,3]
物材機構[1]，高効率電子デバイス材料コンソ[2]，東大生産研[3]，東芝研究開発センター[4]
○Tomoaki Kaneko[1,2], Takahiro Yamasaki[1,2], Nobuo Tajima[1,2,3], Jun Nara[1,2], Tatsuo Schimizu[4],
Koichi Kato[3], Takahisa Ohno[1,2,3]
(1. NIMS, 2. MARCEED, 3. ISS Univ. Tokyo, 4. Toshiba R&D Center)
E-mail: KANEKO.Tomoaki@nims.go.jp

1. 緒言

SiC パワーデバイスでは伝導帯下端近傍に現れる欠陥準位の存在が大きな問題となっている。これまで炭素原子由来の欠陥準位の重要性が示唆されてきたが、欠陥準位の局所的な構造に対する依存性等の詳細な検討はなされていない。本研究では SiC/SiO_2 界面近傍における種々の欠陥に対する系統的な第一原理計算を行い、欠陥準位の局所的な構造に対する依存性について調べた。

2. 計算手法、及び結果

SiC/SiO_2 界面構造として図に示すように Devynck らによる構造モデル[1]を採用し、SiC 4 bilayer を追加し全 333 原子の界面構造とした。界面近傍の欠陥の一例として、図中の 1-10 の酸素原子を酸素と結合した炭素原子で置換して生成したカルボニル基状の欠陥（Si2-C-O）[2]に対する結果を示す。カラーマップ図は理想的な界面構造での局所状態密度(LDOS)に欠陥準位の結果（点線は占有、破線は非占有の状態）を重ねたものである。1, 2, 5, 9 の場合には Si2-C-O の酸素が近傍の他のシリコン原子に近付き（それぞれ 2.26, 2.38, 1.91, 1.98 Ang.）、配位結合を形成した結果、欠陥準位の位置が従来考えられてきた SiC の伝導帯の中[2]からギャップ中に下がってきている事が分かる。このように SiC/SiO_2 界面の欠陥準位の位置は欠陥の局所的な構造（結合長や結合の二面角等）に依存して変化する事が分かった。同様の系統的な計算により得られた他の様々な欠陥（C ダイマー等）に関する欠陥準位の位置の分布についても報告する。



図：SiC/SiO_2 界面構造と欠陥を導入した位置（上）。理想的な界面構造の局所状態密度のカラーマップ表示。Si2-C-O 欠陥の欠陥準位を点線（占有された状態）と破線（非占有の状態）で示した。

[1] Devynck et al. Phys. Rev. B 76, 075351 (2007).
[2] Devynck et al. Phys. Rev. B 83, 195319 (2011).

謝辞：本研究は文部科学省高性能汎用計算機高度利用事業「HPCI 戦略プログラム」分野 4 次世代ものづくりの補助を受け実施された。計算には京コンピュータ及び NIMS スパコンを用いた。

© 2016年 応用物理学会