第一原理計算による窒化処理後の SiC/SiO_2 界面構造探索

First-principles study on electronic structure of SiC/SiO_2 after nitridization

筑波大計算セ　小野 倫也

CCS, Univ. of Tsukuba

Tomoya Ono

Email: ono@ccs.tsukuba.ac.jp

【はじめに】SiC は次世代パワーデバイス用材料の候補として期待されているが、SiC-MOSFET の低いキャリア移動度が本格普及の障害となっている。SiC デバイスの MOS 構造は、主に SiC 基板を熱酸化することによって作成されるが、Si-MOS に比べて界面に生成される欠陥準位密度が高いことが低いキャリア移動度の原因であると指摘されている。NO アニールなどの欠陥減処理は、界面欠陥を減らし移動度向上にある程度の効果があるものの、減処理後の MOS でも SiC バルクの移動度に遠く及ばない。SiC-MOSFT の移動度の向上を目指すべく、本研究では第一原理計算を用いて、SiC/SiO_2 界面の窒化処理前後の原子構造・電子状態の変化を明らかにする。

【計算方法】計算には密度汎関数理論に基づく第一原理計算コード RSPACE[1]を用いた。4H-SiC(0001)/SiO_2 の界面原子構造は、SiO_2 の結晶多形のなかから SiC(0001)表面との格子定数整合がよいものを 4 種類(α -cristbalite, α -quartz, β -cristbalite, β -tridymite)抽出し、界面形成エネルギーが最も小さく、透過電子顕微鏡像で得られる格子間隔と最もよく一致する図 1(a)の構造を使用した。電子間相互作用には局所密度近似、原子核電子間相互作用には PAW 法を用いた。図 1(b)のように界面の C と Si を N や O に置き換え、NO アニールによる N 原子導入後の界面形成エネルギーと電子状態を評価した。

【結果と考察】図 1(b)のように酸窒化が同時進行する場合の界面形成エネルギーは、–3.7 (eV/NO mole.)であった。酸化のみが進行する場合は–2.6 (eV/NO mole.)であることから、NO アニールでは窒化が優先的に進む。また、このような酸窒化界面は SiC の禁制帯中に欠陥準位を作らない。さらに、図 1(b)の界面 N 原子密度 1.6×10^{15} (cm^{-2})は、山田ら[2]の実験結果とも一致する。これらのことから、NO アニールにより、界面に高濃度に N が導入された欠陥準位のない界面が作成され得ることが示唆される。

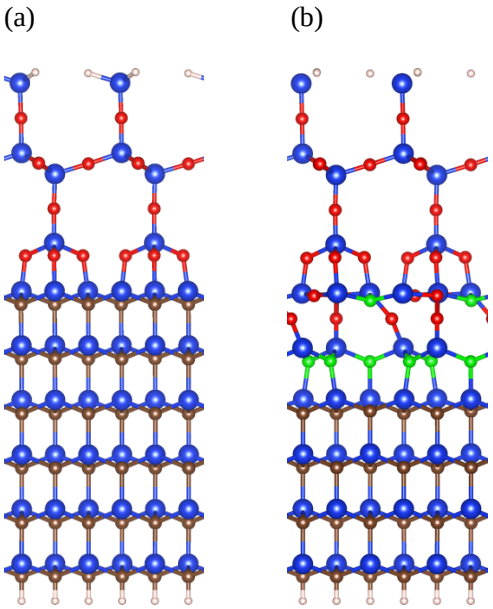

Fig.1 Computational models for initial interface (a) and (oxy)-nitridized interface (b). Blue, brown, red, and green balls are Si, C, O, and N atoms, respectively.

【参考文献】[1] K. Hirose, T. Ono, Y. Fujimoto, and S. Tsukamoto: First-Principles Calculations in Real-Space Formalism - Electronic Configurations and Transport Properties of Nanostructures -, Imperial College Press, London, (2005). [2] 山田他, 第 78 回応用物理学会 秋季学術講演会, (2017).

【謝辞】本研究の一部は、総合科学技術・イノベーション会議の SIP（戦略的イノベーション創造プログラム）「次世代パワーエレクトロニクス」（管理法人：NEDO）によって実施されました。