

# SiC/SiO<sub>2</sub> 界面における欠陥終端の温度依存性に関する第一原理計算

## First Principle Study on Temperature Dependence of Defect Termination at SiC/SiO<sub>2</sub> Interface

°長川 健太<sup>1</sup>, 洗平 昌晃<sup>1,2</sup>, 白石 賢二<sup>1,2</sup>

Graduate School of Engineering, Nagoya Univ.<sup>1</sup>, IMASS, Nagoya Univ.<sup>2</sup>

°Kenta Chokawa<sup>1</sup>, Masaaki Araidai<sup>2,1</sup>, Kenji Shiraishi<sup>2,1</sup>

E-mail: chokawa@fluid.cse.nagoya-u.ac.jp

### 1. はじめに

SiC の熱酸化によって形成された SiC/SiO<sub>2</sub> 界面には未だに多くの欠陥が存在しデバイス性能や信頼性を劣化させる原因となっている。それらの中でも C 原子空孔(V<sub>C</sub>)や Si 原子空孔(V<sub>Si</sub>)が欠陥準位の原因であると考えられている。これらの欠陥により形成された欠陥準位を低減させるため、様々な post oxidation annealing (POA)処理が提案されている。一般に、H<sub>2</sub> ガスを用いた処理は SiC/SiO<sub>2</sub> 界面の界面準位を低減することが知られているが、全ての欠陥準位を取り除くことが出来ない。今後 SiC MOSFET をより高性能化させていくためには、H<sub>2</sub> ガスを用いた POA が空孔欠陥にどのように作用しているかを調べる事が重要である。本研究では第一原理計算を用いて POA により SiC/SiO<sub>2</sub> 界面の空孔欠陥が水素終端されるかを調べた。

### 2. 計算手法と計算モデル

計算には VASP コードを用いた [1]。12 層からなる 4H-SiC(0001)面上に β-tridymite 構造の SiO<sub>2</sub> を積層することで 4H-SiC(0001)/SiO<sub>2</sub> スラブモデルを作成した。この界面から C 原子と Si 原子を取り除き V<sub>C</sub> モデルおよび V<sub>Si</sub> モデルを作成し、これらの空孔欠陥を水素終端することが可能であるかを調べた。終端構造の安定性を議論するために次式を用いて形成エネルギーを計算した。

$$E_{form} = E_{終端構造} - (E_{空孔欠陥} + \mu_{分子})$$

さらに、Gibbs 自由エネルギーを計算することで終端構造の安定性の温度依存性を調べた [2]。

### 3. 結果

原子空孔を作成した結果、V<sub>C</sub> モデルでは Si-Si 結合が、V<sub>Si</sub> モデルでは C-O 結合が形成されており、2つの未結合手が存在している。この未結合手を水素終端しその安定性を確認した。Si 原子空孔においては 1400K を超える高温においても水素による終端が可能であり、界面準位密度低減に有効であることが分かった(Fig. 1(a))。一方で、C 原子空孔においては終端した水素が室温で脱離してしまうことが確認された(Fig. 1(b))。これは SiC/SiO<sub>2</sub> 界面の欠陥準位が H<sub>2</sub> ガスを用いた POA によって十分に取り除くことが出来ない原因であると考えられる。講演では窒素による欠陥終端についても議論する。

### Reference

- [1] G. Kresse and J. Furthmüller, Phys. Rev. B **54**, 11169, (1996).  
 [2] Y. Kangawa et al., Surf. Sci. **493**, 178 (2001).

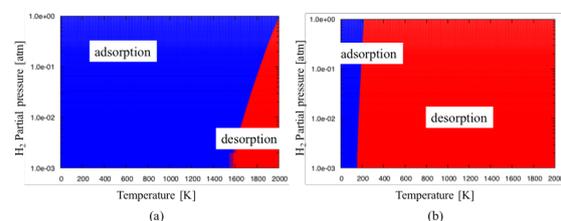


Fig. 1. T-P diagram of H<sub>2</sub> termination for (a) Si vacancy and (b) C vacancy at the 4H-SiC(0001)/SiO<sub>2</sub> interface. Red and blue areas indicate the adsorption condition and desorption condition of H atom from vacancy site.