

## パワーデバイス用Si結晶中のライフタイム制御欠陥の挙動に関する第一原理解析

First-principles analysis of defect behavior related to the bulk lifetime of silicon crystals for power device application

岡山県立大学情報工学部<sup>1</sup>, 千葉工業大学工学部<sup>2</sup>

○土屋 大輝<sup>1</sup>, 末岡 浩治<sup>1</sup>, 山本 秀和<sup>2</sup>

Okayama Prefectural University<sup>1</sup>, Chiba Institute of Technology<sup>2</sup>

○Daiki Tsuchiya<sup>1</sup>, Koji Sueoka<sup>1</sup>, and Hidekazu Yamamoto<sup>2</sup>

E-mail: [tsuchiya.opu@gmail.com](mailto:tsuchiya.opu@gmail.com)

パワーデバイスである IGBT や pin ダイオードなどのバイポーラデバイスにおいて、ターンオフ時にリン (P) ドープ n-Si 層に蓄積した少数キャリアによりテール電流が流れ、スイッチング特性が劣化する。そのため、電子線照射により再結合中心を導入してライフタイム制御を行うデバイスがある。このキャリア・ライフタイム制御欠陥において、通電動作により構造が変化し、ライフタイムが延びてしまうことが問題となっている。しかしながら、そのメカニズムは不明である。なお、キャリア・ライフタイム制御欠陥は  $V-V$  (原子空孔対) や  $V-P$  (空孔リン対) のような深い準位の欠陥と考えられている。これらに、CZ (Czochralski) 法で育成した Si 結晶中に存在している炭素 (C) が格子間 Si 原子  $I$  と反応してできる格子間炭素  $C_i$ 、さらに炭素と酸素の複合体である  $C_i-O_i$  (格子間炭素-格子間酸素) [1]などが悪影響を与えると考えられている。

本研究では、電子線照射により導入される  $V$  と  $I$ 、ドーパント P、不純物 C と O を対象として、 $V-V$ 、 $V-P$ 、 $C_i-O_i$  などの形成過程や互いの相互作用による構造変化の過程に注目した第一原理計算を行った。Si 64 原子モデルの各原子配置における不純物間の結合エネルギーを計算することで、安定な複合体構造を探索することを目的とした。

各反応において複合体が最安定となる時の結合エネルギーを図 1 に示す。ゲッターリングの指標となる Fe と B の結合エネルギー 0.68 eV (図中の横実線) を参照し、これより結合エネルギーが高い反応は起こりやすいと考えた。これより、 $C_s+I$ 、 $C_i+O_i$  の反応に着目すると、ともに結合エネルギーが高く、図 2(a) に示す  $C_i-O_i$  複合体が形成されやすいといえる。また、 $V$  はいずれとも結合エネルギーが高いが、その中でも  $V$  と  $C_i$ 、 $V$  と  $C_iO_i$  は非常に結合エネルギーが高い。 $V+C_i$  の反応では、ダンベル構造が消滅して  $C_s$  となった。 $V+C_iO_i$  も同様に、 $C_iO_i$  のうち  $C_i$  が  $V$  と反応して図 2(b) に示すように  $C_s$  と  $O_i$  に分離した構造で最安定となった。なお、P と  $O_i$ 、 $C_iO_i$  は結合エネルギーが低く、複合体は形成されにくいと言える。

当日は各反応における準安定構造やその他の安定配置についても報告する。

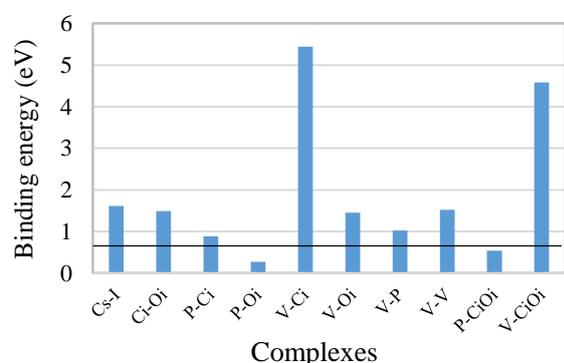


Fig. 1 Binding energy of most stable structure.

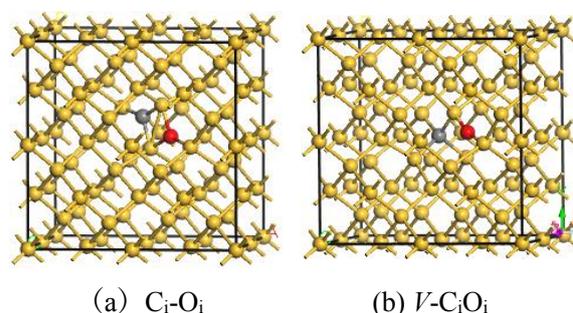


Fig. 2 Most stable structure of  $C_i-O_i$  and  $V-C_iO_i$ .

(Gray / red sphere indicates C / O atom)

### 参考文献

[1] L. I. Khirunenko et al., Phys. Rev. B **78** (2008) 155203-1