

X 線吸収分光による 4H-SiC(m 面)表面に導入された窒素の局所構造解析

Distinguishing nitrogen-containing sites in SiO₂/SiC by X-ray absorption spectroscopy

豊田中研[○]磯村典武, 片岡恵太, 渡辺行彦, 木本康司

Toyota Central R&D Laboratories, Inc.

[○]Noritake Isomura, Keita Kataoka, Yukihiro Watanabe, Yasuji Kimoto

E-mail: isomura@mosk.tytlabs.co.jp

【はじめに】 SiC-MOS パワーデバイスにおいて、キャリア移動度など電気特性の多くは、SiO₂/SiC 界面の状態に支配されている。一般に、一酸化窒素(NO)雰囲気中でのアニールにより特性向上が図られる。このとき SiO₂/SiC 界面に窒素が導入され、その窒素は SiC 側に存在し Si-N 結合を有することまではわかっているが[1]、原子位置(サイト)などの原子構造の特定には至っていない。X 線吸収微細構造(X-ray Absorption Fine Structure: XAFS)分析は、着目原子周辺の局所構造を得ることができる手法である。これを SiO₂/SiC 界面の分析に適用することにより、界面の窒素サイトを特定できる可能性がある。窒素サイトの特定は、様々なサイトを想定したシミュレーションにより求めたスペクトルと比較することにより行う。我々は、SiO₂/SiC(Si 面)界面における窒素サイトの特定に成功した[2]。本研究では、次世代型トランジスタ構造でキャリア移動を担う SiC の m 面に対して窒素サイトの特定を試みた[3]。なお、SiO₂/SiC(m 面)の界面構造は明らかになっていないため、実験・シミュレーション共に SiO₂ の無い SiC 表面に対して行った。

【実験と計算】 実験は、九州シンクロトロン光研究センター(佐賀ライトソース)の偏向電磁石型ビームライン BL12で行った。XAFS 測定は、全電子収量法により N K-edge に対して行った。試料には、4H-SiC(1-100)基板を用いた。SiO₂を化学気相堆積(CVD)により 75 nm 成膜し、NO 雰囲気中で 1000, 1150, および 1300℃でアニールした。フッ酸エッチングにより SiO₂ 膜を取り除き分析に供した。計算は、構造最適化・スペクトルシミュレーション共に、第一原理計算コード CASTEP により行った。第3層の置換サイトに窒素を導入した構造モデルを例として Fig. 1 に示す。

【結果と考察】 実験で得た 1000℃アニール試料の XAFS スペクトルを Fig. 2 に示す。シミュレーション計算で得たスペクトルと比較することにより、窒素サイトは Fig. 1 に示す第3層の炭素サイトであると考えられた。

参考文献 [1] R. Kosugi et al., APL **99**, 182111 (2011).
[2] N. Isomura et al., J. Synchrotron Rad. **26**, 462 (2019).
[3] N. Isomura et al., JJAP **58**, 051007 (2019).

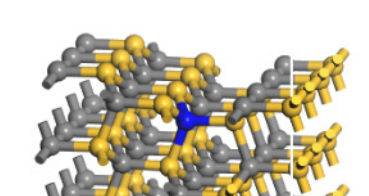


Fig. 1. The geometrically optimized surface structure of 4H-SiC (m face) with nitrogen at the substitutional C sites of the third layer. Yellow, gray, and blue denote the Si, C, and N atoms, respectively.

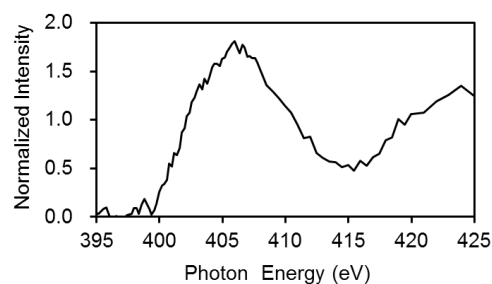


Fig. 2. N K-edge NEXAFS spectra for N-containing SiC samples annealed at 1000 °C in NO ambient.