

第一原理理論計算による 4H-SiC(0-33-8)/SiO₂ 界面構造モデルの提案

Ab-initio study on 4H-SiC(0-33-8)/SiO₂ interface structures and its electronic structures

東工大¹, 富山県立大² ○松下 雄一郎¹, 畠山 哲夫²

Tokyo Inst. Tech.¹, Toyama Pref. Univ.², °Yu-ichiro Matsushita¹, Tetsuo Hatakeyama²

E-mail: pasonal1112@gmail.com

炭化ケイ素(SiC)はワイドギャップを有し、Si の 3 倍の絶縁破壊電界強度を持つことから、パワーデバイス半導体として大きな注目を集めている。しかし、SiC-MOS デバイスは SiC/SiO₂ 界面における高密度界面準位の存在により、移動度がせいぜいバルク時の 10%程度しか出ないことなどが知られている。また、興味深いこととして、界面準位密度は大きな面方位依存性を示し、(a 面や m 面などの)非極性面の方が (Si 面や C 面といった) 極性面よりも界面準位密度が小さく、界面特性が良いことなどが知られている。

近年、NO アニール処理された 4H-SiC(0-33-8)/SiO₂ において高いキャリア移動度が報告され、注目を集めている[1-3]。しかし、4H-SiC(0-33-8)/SiO₂ 界面が何故良いかに関しては依然未解明のままである。そこで、本研究では、4H-SiC(0-33-8)/SiO₂ 界面構造を密度汎関数理論に立脚した理論計算によって明らかにし、4H-SiC(0-33-8)/SiO₂ 界面特性の良さを界面構造の観点から明らかにすることを目的とした。

本計算では、PBE 汎関数と PAW 法を用いた構造最適化計算により界面構造モデルを構築した。まず、我々は 4H-SiC(0-33-8)理想表面構造をスラブモデル計算により求めた。その結果、4H-SiC(0-33-8)表面では、Si 面や C 面と異なり、Si 原子と C 原子が最表面に分布することがわかった。また、4H-SiC(0-33-8)表面上では、C 原子は全て 3 配位でありダングリングボンドを 1 つ持つこと、一方で、最表面 Si 原子は 3 配位 (ダングリングボンド 1 本を有する) と、2 配位 (ダングリングボンド 2 本を有する) のものの 2 種類が共存することがわかった。この表面構造を元に、4H-SiC(0-33-8)/SiO₂ 界面構造を考えると、熱酸化+NO アニールによって最表面 C 原子が N 原子に置換され、2 配位 Si 原子が Si-O-Si ボンドを形成するものと考えられる。その結果、最表面 3 配位 Si 原子 (ダングリングボンド 1 本) において SiO₂ と化学結合を形成するものと思われる。最表面 3 配位 Si 原子の密度を見積もったところ、 $1.7 \times 10^{14} / \text{cm}^2$ であることがわかった。これは、アモルファス SiO₂ の表面 Si 面密度 $2.2 \times 10^{14} / \text{cm}^2$ と良い一致を与えることがわかった。一方で、他の面における表面 Si 面密度はそれぞれ、Si 面では $12.7 \times 10^{14} / \text{cm}^2$ 、a 面では $7.4 \times 10^{14} / \text{cm}^2$ 、m 面では $6.4 \times 10^{14} / \text{cm}^2$ と、いずれもアモルファス SiO₂ のその 3 倍以上大きな値であることがわかった。アモルファス SiO₂ との表面 Si 密度の良い一致が、4H-SiC(0-33-8)面の利点と考えられる[4]。

References [1] S. Yoshida, S. Nishino, H. Harima, and T. Kimoto, Mater. Sci. Forum **389**, 1065 (2002). [2] T. Hiyoshi, T. Masuda, and Y. Namikawa, Mater. Sci. Forum **740**, 506 (2013). [3] T. Hatakeyama, T. Masuda, M. Sometani, S. Harada, D. Okamoto, H. Yano, Y. Yonezawa, and H. Okumura APEX **12**, 021003 (2019). [4] Y. Matsushita and T. Hatakeyama submitted (2019).