

## SiC 酸化膜中の窒素関連欠陥の構造とその電子状態

### Structure of nitrogen-incorporated defects in oxidation films of SiC and their electronic states

東工大フロンティア ○松下 雄一郎, 小林 拓真

Tokyo Tech, °Yu-ichiro Matsushita, Takuma Kobayashi

E-mail: pasonal1112@gmail.com

炭化ケイ素(SiC)はその優れた物性値から次世代パワー半導体材料として注目を集めている。SiCは自然酸化膜として SiO<sub>2</sub> を形成し、SiC MOS デバイスへと利用することができる。しかし、SiC/SiO<sub>2</sub> 界面における高密度界面準位の存在により移動度が理論値の数%程度しか出ないのが現状である。そのため、通常 NO などの窒化界面処理による界面欠陥密度の低減が行われている。NO により供給された大部分の窒素原子は SiC/SiO<sub>2</sub> 界面に分布していることが知られている一方で、ごく一部の窒素原子は SiO<sub>2</sub> 膜中にも取り込まれていることが報告されている [1-2]。また、SiO<sub>2</sub> 膜中の窒素原子は MOS デバイスの移動度を劣化させる原因の 1 つとなっていることも報告されている。SiO<sub>2</sub> 膜中の窒素欠陥の微視的な構造特定とその電子状態を明らかにすることが現在、重要な研究課題となっている。

本研究では、密度汎関数理論に立脚した第一原理計算により SiO<sub>2</sub> 膜中での窒素の欠陥構造特定を行った。具体的には、 $\alpha$ -クォーツ中に窒素原子を導入し、1 配位から 4 配位の取りうる窒素の構造を網羅的に計算し、得られた窒素関連欠陥に対してエネルギー論に立脚して安定性を議論した。その結果、酸素 rich な環境下 (温度 0K) ではほとんどの窒素欠陥の形成エネルギーが正の値を取り、窒素欠陥がエネルギー論的に不安定であることがわかった。一方で、酸素 poor な環境下では負の形成エネルギーを示す窒素関連欠陥がいくつか見られた。SiC/SiO<sub>2</sub> 界面近傍では酸素 poor な環境になっているものと考えられるので、界面近傍において窒素関連欠陥が安定に存在している可能性が示された。また、その中でもエネルギー的に安定なものとして窒素が SiO<sub>2</sub> の酸素サイトを置換した Si-N-Si 構造や、窒素に 3 つのシリコンが配位した N-Si<sub>3</sub> 構造が安定になることが理論的に予想された。

[1] H. Yano, N. Kanafuji, A. Osawa, T. Hatayama, and T. Fuyuki, IEEE Trans. Elec. Devices **62**, 324 (2015).

[2] K. Moges, M. Sometani, T. Hosoi, T. Shimura, S. Harada, and H. Watanabe, APEX. **11**, 101303 (2018).

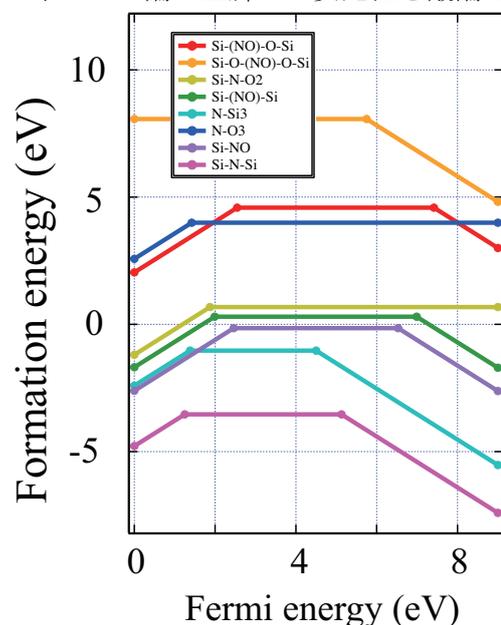


Fig1: Formation energy in the O-poor condition for N-incorporated defects in  $\alpha$ -quartz as a function of the Fermi energy.