

第一原理計算による SiC/SiO₂ 界面近傍の炭素関連欠陥の構造同定

Carbon-Related Defects in SiC/SiO₂ Systems Revealed by First-Principles Calculations

東工大フロンティア¹ ○(P)小林 拓真¹, 松下 雄一郎¹

Tokyo Tech¹, ○Takuma Kobayashi¹, Yu-ichiro Matsushita¹

E-mail: kobayashi.t.cp@msl.titech.ac.jp

SiC MOSFET では、SiC/SiO₂ 界面の高密度欠陥準位による移動度劣化が問題となっている。これまでに C 関連欠陥が界面準位の起源として広く疑われてきたが、その安定構造を界面近傍の全領域 (SiC 側、SiO₂ 側、ジャスト界面) で理論的に調査した報告はほぼ皆無である。そこで我々は、エネルギー論に従い、界面近傍の全領域で C 欠陥の安定構造の同定を行った。さらに、安定な欠陥については欠陥準位の計算も行なったので、それを報告する。

計算コードには Vienna Ab-Initio Simulation Package (VASP) を用い、SiC 中の欠陥については 23 通りの mono-および di-carbon 欠陥、SiO₂ 中については第一原理分子動力学 (MD) 計算で安定と分かった 12 種類の di-carbon 欠陥[1]、ジャスト界面については 79 通りの mono-および di-carbon 欠陥を網羅的に調査した。Fig.1 に欠陥の形成エネルギーの温度依存性を示す: (a) C-rich, O-rich 環境および (b) C-rich, O-poor 環境。O-poor 環境では O-rich 環境と比べ、CO, CO₂ 気体分子のエネルギーと比較した欠陥の形成エネルギーが高いことが見て取れる。また、高温ほど欠陥の形成エネルギーは増加することから、O-poor かつ高温環境が欠陥低減に有効であることが示唆される。実際に高温酸化 (> 1400°C) は界面準位低減に効果的であることが実験的に示されており[2]、本結果と整合する。各環境における最安定の欠陥を見てみると、O-rich 環境においては SiC 中の di-carbon アンチサイト(C₂)_{Si} が最安定であり、O-poor 環境においてはジャスト界面の di-carbon 欠陥 Si-C-C-Si が最安定であることが分かった (Fig.2)。発表ではこれらの欠陥を含め、界面準位の起源として有力な欠陥、およびそれらの欠陥準位について報告する。

[1] Y. Matsushita and A. Oshiyama, *Jpn. J. Appl. Phys.* **57**, 125701 (2018). [2] T. Hosoi, *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* **109**, 182114 (2016). [3] NIST-JANAF Thermochemical Tables [<http://kinetics.nist.gov/janaf/>].

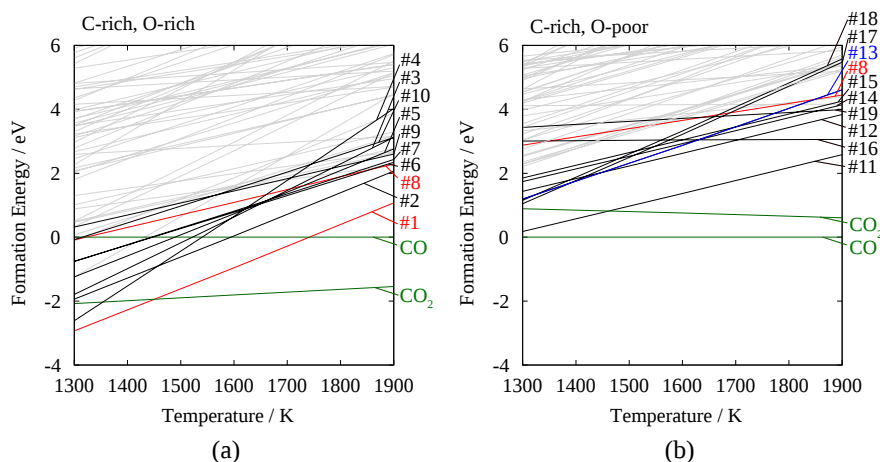


Fig.1: Formation energies of carbon-related defects in comparison with the energies of CO and CO₂ molecules. The temperature dependence is taken into account by correcting the energies of gas molecules with considering the temperature dependent enthalpies and entropies [3]. Red, blue, and black lines correspond to defects in the SiC-side, SiO₂-side, and just at the interface, respectively.

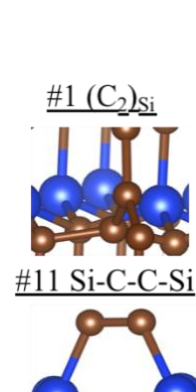


Fig.2: Structures of the di-carbon antisite in the SiC side ((C₂)_{Si}) and the di-carbon defect just at the interface (Si-C-C-Si). Blue and brown balls depict the Si and C atoms, respectively.