## 電場下での金属/(SiC, GaN)界面における欠陥の形成;その理論的検討 Defect formation at metal/(SiC, GaN) interfaces in electric field; First-principles study

## 千葉大理 <sup>(M2)</sup>長澤 立樹,中山 隆史

## Chiba Univ. $\ ^{\circ}(M2)$ Riki Nagasawa, Takashi Nakayama

## E-mail: adga1795@chiba-u.jp

絶縁体・半導体基板中の欠陥の理解は、電子デバイスの信頼性や長寿命化にとり重要である [1-3]。特にデバイス稼働時の電場下の界面では欠陥が生成されることが知られている。これまで 我々は、金属/絶縁体(SiO<sub>2</sub>)界面で高電場は金属原子の侵入を顕著に促進させ、不純物欠陥を発生 させることを明らかにした[4]。同様の高電場は、パワーデバイス材料として期待されているワイ ドギャップ半導体のSiCやGaNにもデバイス稼働時に印可されることが予想される。そこで我々 は前回の発表で、金属/SiC・GaN界面における炭素空孔(Vc)や窒素空孔(V<sub>N</sub>)の形成を検討し、界面 近傍及び電場下の基板内部で原子空孔が形成されやすいことを示した。その原因は空孔と電極間 の電子移動にあり、電場がその電子移動を促進することを明らかにした。原子空孔以外の欠陥が 電場下でどのように振る舞うかは興味深い。そこで今回は、第一原理計算を用いて、電場下での 金属/SiC・GaN界面における原子置換欠陥などの形成について調べ、原子空孔との違いや電場下 での振る舞いを決める物理的要因を明らかにする。

SiC 基板には GaN と比較しやすい構造が同じである 2H-SiC を用いた。原子置換は SiC 中の

Si原子のAl原子置換(Al<sub>Si</sub>)、P原子置換(P<sub>Si</sub>)を調べた。 計算は密度汎関数理論に基づき、VASP code を用い た。電場(金属電極に正電圧を印加)は、金属/SiC 膜の金属膜から電子を抜くことで実現した[4,5]。

Fig.1(a)と1(b)に様々な電場強度下でのAu/2H-SiC 界面における Alsiと Psi 欠陥の形成エネルギー の場所依存性を示す。この結果から、Alsiは電場が 強くなると内部で形成しづらくなっていき、Psi は逆 に内部で形成しやすくなることが分かる。この形成 過程においても、電極と欠陥間での電子移動が重要 であると考えられる。すなわち、Psiの場合は、Pが Siより電子を1個多く持っているため、電場下では 電極に電子がより多く移動することで形成エネルギ ーが小さくなる。一方 Alsiの場合は、Al が電子を1 個不足しているため、電場がない時には電極から欠 陥へ電子移動が起こるが、正電圧を印加するとその 電子移動が妨げられ、形成エネルギーが大きくなっ たと考えられる。このように、界面近傍で形成され る欠陥種は電場の正負によって選択できることが分 かった。講演では、これらの詳細を、GaN 基板の場 合や構造が異なる 4H-SiC 基板の場合の結果も示し 議論する。

C. J. Liu et al., Appl. Phys. Lett. **80**, 2678 (2002). [2]
K. Kawahara et al., J. Appl. Phys. **111**, 053710 (2012).
Z. Yatabe et al., J. Phys. D: Appl. Phys. **49**, 393001 (2016). [4] R. Nagasawa et al., Jpn. J. Appl. Phys. **57**, 04FB05 (2018). [5] Y. Asayama et al., Mater. Sci. Semicond. Process. **70**, 78 (2017).



Fig. 1 Calculated formation energy of (a)  $Al_{Si}$  and (b)  $P_{Si}$  defects in various electric fields, as a function of distance from Au/2H-SiC interface. Formation energy is  $E_{form} = E^q(X_{Si}) - E^q(0) + \mu_{Si} - \mu_X (X=Al, P)$ , which  $E^q$  means total energy in an electric field,  $\mu_X$  is a bulk energy of X and  $\mu_{Si} = \mu_{SiC} - \mu_c$  (C bulk energy).