

X線吸収分光による SiO₂/SiC 界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, 朽木克博, 片岡恵太, 渡辺行彦, 木本康司

Toyota Central R&D Laboratories, Inc.

[○]Noritake Isomura, Katsuhiko Kutsuki, Keita Kataoka, Yukihiko 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て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。本研究では、SiO₂/SiC 界面における窒素サイトの特定を試みると共に、NO アニール前のドライ酸化の有無による違いについても調べる。

【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、2つの 4H-SiC(0001)基板を用いた。1つは、NO 雰囲気中 1300°C でアニールした(以降、NO-ox)。他方は、1300°C でドライ酸化した後に、NO-ox と同条件で NO アニールした(以降、NO-POA)。2つの試料共に、SiO₂ 膜をフッ酸エッチングにより約 3 nm に薄膜化した。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。基本となる界面構造モデルは、β-tridymite SiO₂/4H-SiC(0001)とした(図1)。この構造は Ono と Saito によって提案され、検討された SiO₂ の結晶構造の中で SiC との格子定数不整合比が最も小さい[2]。

【結果と考察】 実験で得た NO-ox の XAFS スペクトルを図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NO-ox ではC置換、NO-POA では SiC 中の格子間であると考えられた[3]。XAFS 分析により、SiO₂/SiC 界面の窒素サイトを特定した。

参考文献 [1] R. Kosugi et al., APL 99, 182111 (2011). [2] T. Ono and S. Saito, APL 106, 081601 (2015). [3] N. Isomura et al., submitted.

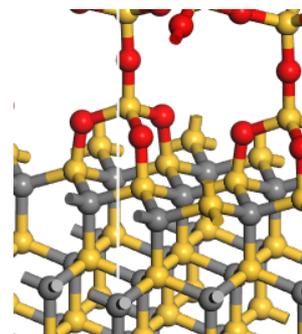


Fig. 1. The initial interface structure of β-tridymite SiO₂/4H-SiC(0001). Yellow, gray, and red denote the Si, C, and O atoms, respectively.

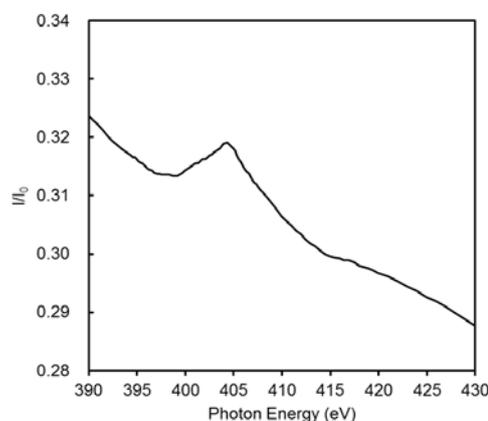


Fig. 2. N K-edge XAFS spectrum for the N-containing SiO₂/SiC sample (NO-ox).