

4H-SiC バルクにおける窒素添加異方性の第一原理計算

First-principles study of anisotropy of nitrogen incorporation into bulk 4H-SiC

神戸大工¹, [○]小松直貴¹, 植本光治¹, 小野倫也¹Kobe Univ.¹, [○]Naoki Komatsu¹, Mitsuharu Uemoto, Tomoya Ono¹

E-mail: 209t220t@stu.kobe-u.ac.jp

ワイドバンドギャップの半導体である窒化ケイ素(SiC)は、高耐圧で低損失、高速スイッチング可能な次世代のパワーエレクトロニクス向け材料として注目を集めている。SiC の MOS-FET ではポスト酸化処理として窒素系ガスをもちいたアニーリングを施すことで移動度の改善が報告されている [1]。窒素アニーリングの起こりやすさには異方性があることが実験的に報告されているが、このメカニズムは十分に理解されているわけではない。そこで本研究では、第一原理電子状態計算コード「RSPACE」を用いて[2]、アニールの進行しやすい方向について調べる。図 1 は a 面に平行に窒化膜を形成した場合の計算モデルを示す。a 面、m 面、Si 面に平行に窒化膜を形成し、エネルギーの評価を行うと、a 面、m 面、Si 面の順でエネルギーが高くなった。図 2 に示す PDOS より、窒化による Si の結合準位のエネルギーが安定化していることが分かる。SiC 結晶に N を添加する時、2 個の N 原子と結合した Si 原子が多いものほどエネルギー的に安定な傾向がある。a 面に平行な窒化膜は、N 原子 2 個と結合した Si 原子数が最大となり、Si 面に平行な窒化膜では最小となる。この結果より、窒化の面方位依存性は Si の結合に対する N の配位数に関係するものと予想される。さらに、バンドギャップは、a 面に平行な窒化窒化膜の場合には 4H-SiC と比較して 0.3eV、m 面では 0.2eV、Si 面では 0.1eV 広がった。これは、SiC の伝導帯端準位は、(0001)面に平行に分布するため、(0001)面に対して垂直に窒化面が形成された場合、伝導帯端準位に量子閉じ込め効果が働き、準位のエネルギーが上がるためである。講演では、窒化による電子状態の変化と形成エネルギーに関する結果を紹介し、4H-SiC MOS の窒化に最も適した面を議論する。

[1] T. Kobayashi *et al.*, J. Appl. Phys. 121, 145703 (2017).

[2] T. Ono, K. Hirose, Phys. Rev. Lett. 82 5016 (1999).

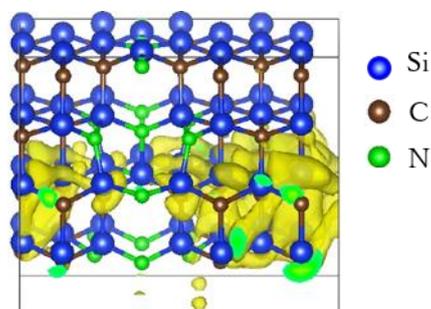


図 1 a 面に平行な窒化膜の計算モデルと電子密度分布。a 面に平行な窒化膜の計算モデル(青緑茶)と電子密度分布(黄)。N 添加前のセルは Si と C 原子それぞれ 64 原子で構成される。

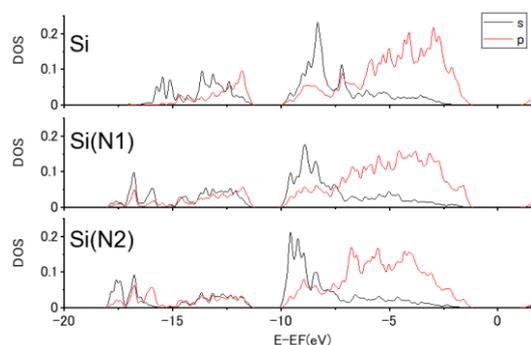


図 2 SiN 結合数と状態密度分布の変化。Si は N 原子 0 個、Si(N1)は 1 個、Si(N2)は 2 個と結合した Si 原子を示す。