

第一原理計算で生成した 4H-SiC 結晶内 C-C 欠陥の ELNES 理論解析

The C-K edge ELNES analysis of C-C defect model in SiC by first principle calculation.

富士電機, °広瀬 隆之、寺尾 豊、寺西 秀明、瀧川 亜樹

Fuji Electric °Takayuki Hirose, Yutaka Terao, Hideaki Teranishi, Aki Takigawa

E-mail: hirose-takayuki@fujielectric.com

【はじめに】 SiC を用いた MOSFET は次世代パワーデバイスとして期待されているが、SiO₂/SiC 界面近傍のトラップ電荷密度が高く、チャネル移動度低下といった性能低下の問題を抱えている。界面近傍のトラップ電荷密度が高い原因の一つに、SiC/SiO₂ 界面近傍の炭素欠陥(余剰炭素)が指摘されている[1]、[2]。これまで我々のグループでは電子エネルギー損失微細構造(ELNES)スペクトル解析によって SiO₂/SiC 界面近傍で π 結合を持つ炭素の存在を示す π^* ピークが検出されることを報告してきた[3]、[4]。この π^* ピークは酸化膜側だけでなく SiC 結晶内にも生成していることが断面透過電子顕微鏡(TEM)観察と ELNES 分析によって観測され、その起源として C-C 欠陥が推測されている。Chokawa ら[5]は、SiC 表面の酸化で生じた歪みの影響で C-C 欠陥が生成すると報告しており、ELNES 分析で観測された SiC 側の C-C 欠陥は酸素の影響で生成している可能性がある。そこで本研究では SiC 結晶内の酸化による C-C 欠陥生成と、それが π^* ピークを生成するかを第一原理計算によって解析した。

【計算】Chokawa らの方法と同様に 4H-SiC 結晶内部に酸素原子を配置したモデルに対して第一原理計算ソフト CASTEP*で構造最適化計算を行い、これを酸素原子 6 個導入するまで繰り返した。酸素の配置は C 面や Si 面の酸化を考慮して c 軸に垂直な面内にした。ELNES の計算では溝口らの方法[6]、[7]を基に実施した。

【結果と考察】 Fig.1 に 6 個まで酸素原子を導入して得られたモデルを示す。3 配位炭素 (C-1) と 4 配位炭素 (C-2) が生成された。これら炭素(C-K 損失端)の ELNES 計算結果と SiO₂/SiC 界面の ELNES スペクトル分析結果の比較を Fig.2 に示す。3 配位炭素の ELNES 計算結果では 286 eV 付近に鋭いピークが現れ、界面の分析スペクトルで観測される 286 eV 付近の π^* ピークによるショルダーに対応している。一方、4 配位炭素ではショルダーに対応するピークは現れなかった。今回の解析によって SiC 結晶内部に酸素が入ることによって 3 配位炭素が生成することで、 π^* ピークが現れることが分かった。

【謝辞】 本研究でのシミュレーションモデル作成は、名古屋大学未来材料・システム研究所の白石賢二教授、洗平昌晃助教から助言を頂き実施致しました。深く感謝致します。

[1] K. C. Chang et al., Appl. Phys. Lett., 77, 2186 (2000) [2] T. Kobayashi and T. Kimoto, Appl. Phys. Lett. 111, 062101 (2017) [3] 寺尾, 広瀬, 寺西, 佐藤, 瀧川, 第 65 回応用物理学会春季学術講演会 18p-P14-15(2018) [4] Y. Terao et al., 49th IEEE Semiconductor Interface Specialists Conference(2018) [5] K. Chokawa et al., Materials Science Forum Vols. 740-742 (2013) pp469-472

[6] <http://www.edge.iis.u-tokyo.ac.jp/CASTEP-ELNES-manual.htm>

[7] T. Mizoguchi, et al., J. Phys.: Condens. Matter 21 (2009) 104204

※ダッソー・システムズ社製の MS-CASTEP を用いた。

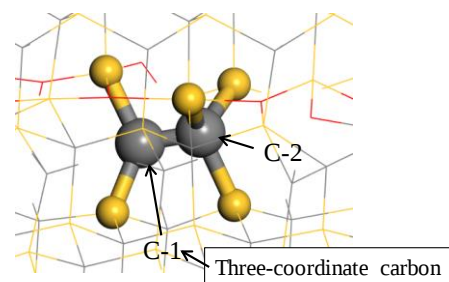


Fig.1 C-C defect model obtained by first principle calculations. Gray, yellow balls and red lines are carbon, silicon, and oxygen, respectively.

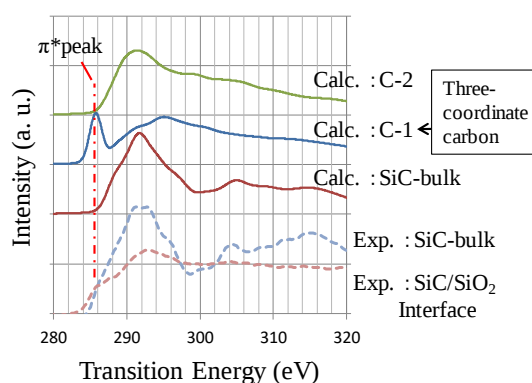


Fig.2 Experimental and calculated C-K edge ELNES spectra