

第一原理計算による 4H-SiC MOS における 窒素アニール後の原子構造の探索

First-Principles Study of Nitrogen Annealed SiC MOS structure

神戸大工¹, °植本 光治¹, 小松 直貴¹, 小野 倫也¹

Kobe Univ.¹, °Mitsuharu Uemoto¹, Naoki Komatsu, Tomoya Ono²

E-mail: uemoto@eedept.kobe-u.ac.jp

炭化ケイ素(SiC)はワイドバンドギャップの半導体であり、その耐圧性や高速性から次世代のパワーエレクトロニクス向け材料として近年注目を集めている。しかしながら、SiC の MOS-FET ではチャネル移動度がバルクに比べ大幅に低下することが知られ、応用上の障害となっている。その原因として、熱酸化で作成された SiO₂/SiC MOS 界面の欠陥準位によるキャリア散乱がある。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]。これは、N 原子が SiO₂/SiC 界面に侵入することで、界面原子構造の乱雑さの緩和・欠陥準位が取り除かれるものと考えられているが、N 原子が入る位置やアニールの進行しやすい方向について、いまだ十分に理解されているとは言い難い。

我々はこれまで、密度汎関数理論に基づく第一原理電子状態計算コード「RSPACE」の開発をすすめており[2]、同コードを駆使し SiC の MOS 界面における原子構造の探索や、伝導率計算をおこなってきた[3,4]。本研究では、第一原理電計算により SiC 中の N 原子・Si 欠陥の安定性の評価をおこない、アニールによる N 原子の侵入の起きやすい原子位置・面方位について議論する。

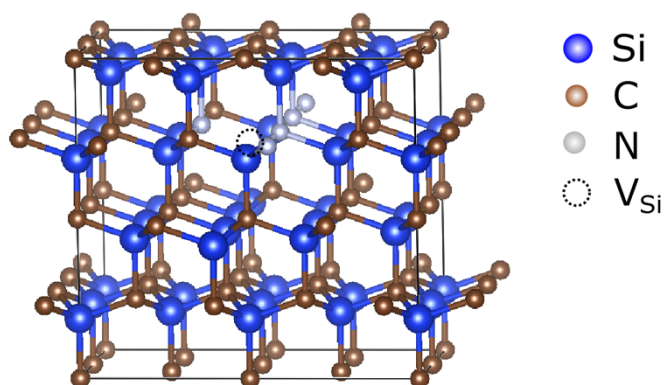


図 1 原子モデルの例(SiC スーパーセル)図中心部に V_{Si} とそれを取り囲むよう N 原子が C 位置に入る

原子構造モデルとして、4H-SiC スーパーセル中の Si 位置と C 位置を、それぞれ空孔(V_{Si})と N 原子への置換を施したもの (図 1 例) を仮定する。複数の V_{Si}・N 欠陥をセル中に含む場合、その位置関係の違いによる構造最適化後の形成エネルギー差を評価する。

本発表では、k 面・h 面などいくつかの特徴的な結晶面に沿ってバルク中の窒化が進行する場合や、MOS 界面付近でのふるまいについて紹介する予定である。

- [1] T. Kobayashi, S. Nakazawa, T. Okuda, J. Suda, T. Kimoto, J. Appl. Phys. 121, 145703 (2017) [2] T. Ono, K. Hirose, Phys. Rev. Lett. 82 5016 (1999)., [3] T. Ono, S. Saito, Appl. Phys. Lett. 106 08160 (2015)., [4] S. Iwase, C. J. Kirkham, T. Ono, Phys. Rev. B 95 041302 (2017).