

## 4H-SiC/SiO<sub>2</sub> 界面での窒素酸化物およびアンモニアの反応機構の理論的検討 Ab initio study for reaction of nitrogen oxide and NH<sub>3</sub> at 4H-SiC/SiO<sub>2</sub> interface

三重大院工<sup>1</sup>, 島根大院自然科学<sup>2</sup>, 名大未来研<sup>3</sup>

○秋山亨<sup>1</sup>, 清水紀志<sup>1</sup>, 伊藤智徳<sup>1</sup>, 影島博之<sup>2</sup>, 白石賢二<sup>3</sup>

Mie Univ.<sup>1</sup>, Shimane Univ.<sup>2</sup>, Nagoya Univ.<sup>3</sup>

○Toru Akiyama<sup>1</sup>, Tsunashi Shimizu<sup>1</sup>, Tomonori Ito<sup>1</sup>, Hiroyuki Kageshima<sup>2</sup>, Kenji Shiraishi<sup>3</sup>

E-mail: akiyama@phen.mie-u.ac.jp

【はじめに】4H-SiCは優れた物性に加え、熱酸化によりSiO<sub>2</sub>絶縁膜が得られることからパワーデバイスへの適用が可能な材料として注目を集めている。しかしながら、SiC/SiO<sub>2</sub>界面では大量の欠陥が形成することが知られており、4H-SiCを用いた金属-酸化物-半導体電界効果トランジスタ(MOSFET)のデバイスの信頼性を低下させる原因となっている。界面トラップ密度( $D_{it}$ )を低減する手段として、NO分子による酸化後のアニーリング(NO-POA)が用いられており[1,2]、さらにN<sub>2</sub>OやNH<sub>3</sub>を用いたPOA[3,4]も報告されている。しかしながら、これらアニーリング種の4H-SiC/SiO<sub>2</sub>界面での挙動およびアニーリング後の構造についてはまだ不明な点が多いのが現状である。これまでに我々は、NO-POAによる $D_{it}$ 低減の物理的起源を明らかにするために4H-SiC/SiO<sub>2</sub>界面でのNO分子の反応経路探索を行い、Si-N結合の形成により界面が安定化し、さらに局在する電子状態が反応後の界面では消失することを明らかにした[5]。本研究では、POA過程におけるアニーリング種依存性を明らかにするため、4H-SiC/SiO<sub>2</sub>界面におけるN<sub>2</sub>OおよびNH<sub>3</sub>分子の反応経路探索を行い、反応機構およびその面方位依存性について議論する。

【結果および考察】Table 1は、第一原理計算を用いてSi面およびC面においてそれぞれC-CおよびC=C結合が形成された4H-SiC/SiO<sub>2</sub>界面[6]におけるNO、N<sub>2</sub>OおよびNH<sub>3</sub>分子での界面反応に対する反応の終状態構造の原子配置、反応熱 $E_{rc}$ (反応前後の構造におけるエネルギー差)および反応のエネルギー障壁値 $E_b$ を示したものである。この表から、アニーリング種および面方位に依らず反応後においてはカーボンオキサイド(COおよびCO<sub>2</sub>分子)が形成することが分かる。N<sub>2</sub>O分子においてはNO分子と同様の反応が起こり、COおよびCO<sub>2</sub>分子の脱離とともにSi<sub>3</sub>-N(3つのSi-N結合)およびSi<sub>4</sub>-N(4つのSi-N結合)が形成する。一方、NH<sub>3</sub>分子の反応においては面方位に依存して界面でSi-HおよびC-H結合を含む様々な原子配置が出現する。Si面においてはNO分子における $E_b$ がN<sub>2</sub>OおよびNH<sub>3</sub>分子における $E_b$ より低く、C面においても同様の傾向が見られる。これら $E_b$ の値(最大で3.4 eV)とアニーリング種に依存した $E_b$ の違いから、通常のアニーリング温度(1050~1250 °C)においてはこれらの反応が十分に起こり得るとともに、NO分子によるPOA( $E_b$ が低い)最も起こり易いことが示唆される。実際に、 $E_b$ の値が大きいN<sub>2</sub>O分子におけるPOAの温度(~1350 °C) [4]はNOやNH<sub>3</sub>分子を用いたPOAの温度より高いものとなっている。講演では、これら界面反応に対する計算結果に加えて電子状態解析の結果についても議論する。

【参考文献】 [1] G. Y. Chung *et al.*, Appl. Phys. Lett. **76**, 1713 (2000). [2] K. McDonald *et al.*, J. Appl. Phys. **93**, 2719 (2003). [3] G. Y. Chung *et al.*, Appl. Phys. Lett. **77**, 3601 (2000). [4] L. K. Swanson *et al.*, Mater. Sci. Forum **740-742**, 713 (2013). [5] T. Shimizu *et al.*, Jpn. J. Appl. Phys. **60**, SBBD10 (2021). [6] T. Akiyama *et al.* Surf. Sci. **641**, 174 (2015).

**Table 1** Final atomic configuration, calculated reaction energies and energy barriers ( $E_{rc}$  and  $E_b$ , respectively) for the reactions of NO, N<sub>2</sub>O, and NH<sub>3</sub> molecules at the Si- and C-face interfaces. The results of NO have been obtained in previous calculations. [5]

Orientation	Molecule	Final atomic configuration	$E_{rc}$ (eV)	$E_b$ (eV)
Si-face	NO	Si <sub>4</sub> -N + Si <sub>4</sub> -C + CO <sub>2</sub>	8.50	1.2
	N <sub>2</sub> O	2Si <sub>4</sub> -N + Si <sub>4</sub> -C + CO + CO <sub>2</sub>	7.37	2.6
	NH <sub>3</sub>	Si <sub>4</sub> -N + 2Si-O-H + Si-H + CO	4.13	2.2
C-face	NO	Si <sub>3</sub> -N + C-C=O + CO <sub>2</sub>	7.85	0.8
	N <sub>2</sub> O	2Si <sub>3</sub> -N + 3CO	5.97	3.4
	NH <sub>3</sub>	Si-NH-C-Si + Si-O + C-H + Si-O-H + CO <sub>2</sub>	3.59	1.7