

第一原理計算による SiC 側に導入された窒素の SiC(11 $\bar{2}$ 0)/SiO₂ 界面近傍における電子状態の計算

Effect of nitrogen introduced in the SiC side on the electronic states

near the SiC/SiO₂ interface by first-principles calculations

東工大, 株式会社 Quemix, QST °立木 馨大, 西谷 侑将, 岩田 潤一, 松下 雄一郎

1. Tokyo Institute of Technology, 2. Quemix Inc., 3. QST °Keita Tachiki¹, Yusuke Nishiya^{1,2},

Jun-ichi Iwata^{1,2}, Yu-ichiro Matsushita^{1,2,3}

E-mail: tachiki@semicon.kuee.kyoto-u.ac.jp

背景: SiC MOSFET では SiC/SiO₂ 界面に存在する高密度界面準位低減のため、NO ガス中での熱処理により界面の窒化を行う。窒化処理を行うと SiC/SiO₂ 界面に大量の($\sim 1 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$)の窒素が導入されることが SIMS 分析や XPS 分析からわかっているが[1, 2]、これが界面欠陥にどのような影響を与えているかは明らかになっていない。界面に導入された N は SiC/SiO₂ 界面に存在するダングリングボンドを終端すると考えられてきている。一方近年、窒化処理によって N が界面のみならず、SiC 中に拡散しているという報告があるが、それがデバイスにどのような影響を与えるのかという研究は極めて限られている[3-6]。このため本研究では、界面近傍における窒素がどのように電子状態に影響を与えるかを明らかにすることを目的とし、SiC/SiO₂ 界面近傍に N が高密度にドーパントとして導入された場合どのように電子状態に影響を与えているかを第一原理計算により解析した。本研究では、実際の MOSFET のオン状態を想定し、外部から電場を印加した場合において波動関数や局所状態密度 (LDOS) がどのように変化するかを計算した。

計算手法: 本研究での計算は RSDFT コードを用いて行った。交換・相関エネルギーとして一般化密度勾配近似の PBE を使用した。本計算では 4H-SiC(11 $\bar{2}$ 0)のスラブモデルを用いた。スラブモデルでは、面内方向に(1×1)構造を、厚み方向に 12 原子層 (37 Å) の構造を採用し、真空層の厚み 20 Å を採用した。その結果、シミュレーションセルにおける全原子数は 216 原子。そのうち 4H-SiC の原子数は 200 原子で、水素の原子数は 16 である (a=5.36 Å, b=61.9 Å, c=10.1 Å)。本研究で注目する SiC 側界面近傍での窒化のドーピング効果を調べるために、virtual crystal approximation(VCA)を採用した。具体的には、Si 原子の擬ポテンシャルや C 原子の擬ポテンシャルを、Al や N をドーブした場合を想定し作成した。窒素ドーブ深さは 0.6, 2.3, 3.7 nm の三種類である。ドーピング密度に換算すると Al, N はそれぞれ約 5×10^{17} , $5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ となる。印加電界はスラブ内すべての方向で一定であり、0 MV/cm, 5 MV/cm, 10 MV/cm の 3 種類である。

結果および考察: 窒化によるドーピング領域が界面から 3.7 nm 以下であれば電子状態に対して大きな影響はないが、ドーピング領域が界面から 3.7 nm 程度と比較的広がると、LDOS や波動関数に大きな影響を与えることがわかった。外部から電界が印加された場合、窒化領域が 3.7 nm ある場合は、半導体界面のバンドベンディング量がノンドーブの場合と比較して少なくなり、量子閉じ込め効果の影響が小さくなった。量子閉じ込め効果の影響が小さくなることにより、伝導帯下端のサブバンド (E_{c1}) のエネルギー位置が低くなることに加え、 E_{c1} を基準としたときの伝導帯下端から 2 本目のサブバンド (E_{c2}) のエネルギー位置も低くなるため、反転層中に誘起される電子密度が増加すると考えられる。興味深いことに、外部電界が 10 MV/cm ($E_{\text{eff}} \sim 2.4 \text{ MV/cm}$) と、極めて表面電界が大きい場合においても量子閉じ込め効果が抑制されることが分かった。これは、従来の埋め込みチャネル MOSFET とは異なり、表面電界が高電界の場合でも高いチャネル移動度が得られる可能性を示している。波動関数に関しては、電界を印加した場合でもピークが大きく界面から引き離される方向へとシフトした。これにより、界面での電子の散乱の影響が小さくなり、電子の移動度が向上すると考えられる。

[1] H. f. Li et al., J. Appl. Phys. 86, 4316 (1999). [2] P. Jamet et al., Appl. Phys. Lett. 79, 323 (2001). [3] J.P. Fiorenza, et al., Appl. Phys. Lett. 103, 153508 (2013) [4] K. Moges et al., Appl. Phys. Express 11, 101303 (2018) [5] T. Umeda, et al., Appl. Phys. Lett. 113, 061605 (2018), [6] T. Umeda et al., J. Appl. Phys. 127, 145301 (2020).