

ステップを持つ SiC MOS 界面における NO 窒化処理の移動度改善効果の解析

DFT study on effect of NO annealing on mobility at SiC/SiO₂ with atomic scale steps

神戸大工¹、関学大² (B4)松木 七星斗¹、(M2)横田 知真¹、植本 光治¹、細井 卓治²、小野 倫也¹

Grad. Schl. Eng., Kobe Univ.¹, Kwansei Gakuin Univ.²

Nahoto Funaki¹, Kazuma Yokota¹, Mitsuharu Uemoto¹, Takuji Hosoi², Tomoya Ono¹

Email: 1904312t@stu.kobe-u.ac.jp

【はじめに】SiC は優れた絶縁破壊強度や熱伝導率により、Si に代わる次世代パワーデバイスとして期待されている。しかし、SiC/SiO₂ 界面には多数の欠陥が存在し、界面の移動度はバルク中の移動度に比べて著しく低い。NO アニールによって可動キャリアが増えても MOS 界面の移動度は期待されたほど上がらない。4H-SiC(0001)面は原子レベルで平坦でなく、表面原子構造は SiC 基板作製プロセスに起因するステップを持つ。ステップを持つ表面を熱酸化して MOS 界面を作るとステップが界面に残り、ステップ端が界面欠陥の一つとなりうる。本研究では、第一原理計算を用いて SiC/SiO₂ ステップ界面における窒化前後の電子状態の変化を調べる。

【計算方法】計算には密度汎関数理論に基づく第一原理計算コード RSPACE[1]を用いた。電子間相互作用には局所密度近似、原子核電子間相互作用には PAW 法を用いた。窒化前後の界面は図 1(a),(b)に示す。SiO₂ は、 α -cristobalite 構造を用いた。窒

化後の構造は文献[2]の構造を用いた。

【結果と考察】局所状態密度を計算することにより、窒化前後の界面の電子状態を比較した。窒化前の界面では、上側テラスと SiO₂ の結合状態によっては、上側テラスの直下に伝導帯端準位が現れない。一方、窒化後の界面では、上側テラスの直下に準位が出現した。これは窒化によ

る窒化膜挿入により SiO₂ との結合構造の影響が遮蔽され、界面の電子状態が整えられる。したがって、界面にトラップされるキャリアが減り、可動キャリアが増えることを示唆する。講演では、SiC の積層構造と SiO₂ の構造がステップ界面の電子状態に与える影響とキャリアのトラップについて議論する。

【参考文献】[1] K. Hirose, T. Ono, Y. Fujimoto, and S. Tsukamoto: First-Principles Calculations in Real-Space Formalism - Electronic Configurations and Transport Properties of Nanostructures -, Imperial College Press, London, (2005). [2] N. Komatsu, M. Ohmoto, M. Uemoto, T. Ono, J. Appl. Phys. **132** 155701 (2022).

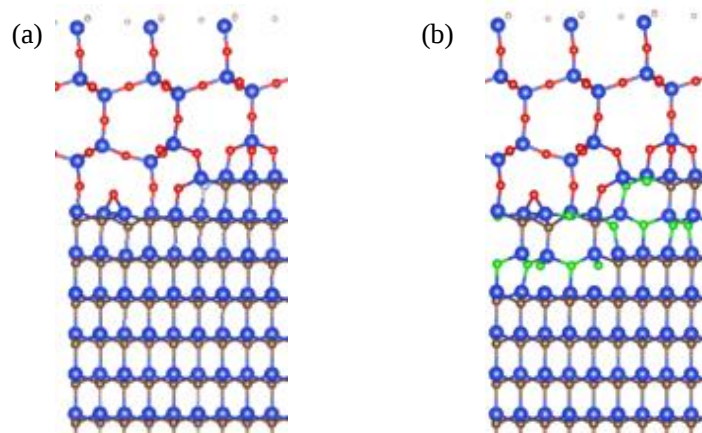


図 1 (a) 窒化前のステップ界面モデル。(b) 窒化後のステップ界面モデル。青球は Si 原子、茶球は C 原子、赤球は O 原子、緑球は N 原子、灰球は H 原子を表す。