

4H-SiC/SiO₂ 界面におけるバンド配列の面方位依存性に関する理論検討

Ab initio study for orientation dependence of band alignments at 4H-SiC/SiO₂ interface

三重大院工¹, 富山県立大², 名大未来研³, 千葉大理⁴

○(M1) 松田隼¹, 秋山亨¹, 畠山哲夫², 白石賢二³, 中山隆史⁴

Mie Univ.¹, Toyama Pref. Univ.², Nagoya Univ.³, Chiba Univ.⁴

°Shun Matsuda¹, Toru Akiyama¹, Tetsuo Hatakeyama², Kenji Shiraishi³, Takashi Nakayama⁴

E-mail: 422m613@m.mie-u.ac.jp

【はじめに】SiCはSiに比べて優れた物性値を有し、Siと同様に熱酸化過程によってSiO₂絶縁膜を形成するため、金属-酸化物-半導体電界効果トランジスタ(MOSFET)への応用が期待されている[1]。しかしながら、熱酸化過程においてSiC/SiO₂界面において大量の欠陥が発生することにより、SiC-MOSFETのキャリア移動度を低下させてしまうことが課題となっている[2]。したがって、SiC/SiO₂界面における界面構造と電気特性との関係の理解とその制御はデバイスの開発において重要な課題となっている。特に、界面でのバンド構造はMOSFETの信頼性を議論するうえで重要な指標となることが指摘されている[3]。しかしながら、その物理的起源については不明な点も多い。さらに、界面移動度を低下させる原因として界面固有の双極子の形成も提案されている[4]。そこで本研究では、基板となるSiCの面方位や界面において結合する原子種が異なる様々なモデル[5]に対する電子状態(バンド配列)および界面での電荷移動を第一原理計算にもとづき解析し、界面構造とバンド構造との関係性を検討する。

【結果および考察】Fig. 1はSi面、C面およびm面における界面[5]での伝導帯オフセットおよび価電子帯オフセットを示したものである。この図から、C面およびm面に比べてSi面のほうが小さな価電子帯オフセット(大きな伝導帯オフセット)をもつことが分かり、オフセットの面方位依存性の傾向はX線光電子分光

(XPS)による測定結果[4]とコンシステントな結果となっている。また、Si面において界面のSi原子からO原子へと電子が大きく移動しており、界面において大きな双極子が形成していることも見出された。従って、界面での双極子の形成によって4H-SiCの価電子帯が押し上げられて、その大きさに応じてバンドオフセットが変化することが示唆される。講演では、酸化膜にアモルファスSiO₂を用いた界面原子構造とそのバンドオフセットの評価についても議論する。

【参考文献】[1] C. I. Harris and V. V. Afanasev, *Microelectronic Eng.* **36**, 167 (1997). [2] V. V. Afanasev, M. Bassler, G. Pensl, and M. Schulz, *Phys. Status Solidi A* **162**, 321 (1997). [3] H. Watanabe *et al.*, *Mater. Sci. Forum* **679-680**, 386 (2011). [4] T. Hatakeyama *et al.*, *J. Appl. Phys.* **131**, 145701 (2022). [5] T. Akiyama *et al.*, *Surf. Sci.* **641**, 174 (2015).

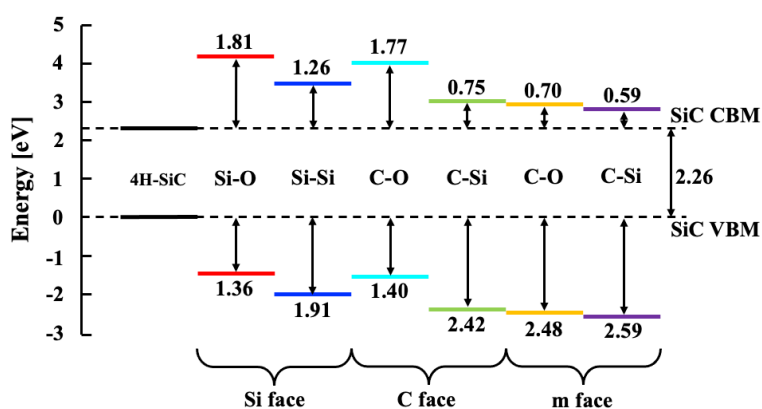


Fig. 1 Schematics of band alignments for six different 4H-SiC/SiO₂ interface structures. Si-O, Si-Si, C-O, and C-Si represent the bonding atomic species at the interface. The valence band maximum and conduction band minimum of SiC (SiC-VBM and SiC-CBM, respectively) are shown by dashed lines.