

第一原理計算による wet 酸化 SiC (000-1)/SiO₂ 界面の欠陥構造解析

First-principles study on defect structure of SiC(000-1)/SiO₂ interface with wet oxidation

神戸大工 (M1) 網崎 夢開、(B4) 民部 優輝、植本光治、小野 倫也

Grad. Schl. Eng. Kobe Univ. Mukai Tsunasaki, Yuki Mimbu, Mitsuharu Uemoto, Tomoya Ono

E-mail: 201t238t@stu.kobe-u.ac.jp

【はじめに】4H-SiC の MOSFET では Si 面と呼ばれる(0001) 面を dry 酸化させることが多いが、C 面と呼ばれる(000-1) 面を wet 酸化させる方が、移動度が高いという報告がある[1][2]。これは、界面付近の欠陥による影響と考えられる。SiC 結晶中の Si 空孔に起因する欠陥として、Si 原子が C 原子に置換され、その最近接 C 原子の 1 つがなくなった構造(C_{Si}V_C)と、Si 原子と C 原子の両方がなくなった構造(V_{Si}V_C)が提案されている。さらにこれらの欠陥は、X_{Si}(X=C or V)と V_Cが c 軸方向に並ぶ c-axial 構造と、basal 面内に並ぶ basal 構造に分類される。梅田らは、(000-1) 面の dry 酸化ではこれらの構造 4 種類すべてが EDMR で観測されるが、wet 酸化では C_{Si}V_C c-axial と V_{Si}V_C basal の 2 種類しか観測されないと報告している[3]。しかし、その原因については明らかになっていない。本研究では、第一原理計算により wet 酸化では 2 種類の欠陥構造しか観測されない原因を明らかにすべく、4 種類の界面欠陥の形成エネルギーと、C 原子と Si 原子の未結合手に対する H 原子の振る舞いを調べた。

【計算条件】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 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。界面モデルは 6 層の SiC bilayer と 1 層の SiO₂ 酸化膜からなり、両面の未結合手は H 原子で終端した。a、c を 4H-SiC の格子定数として、界面モデルのスーパーセルサイズは、4a×2√3a×9c、結晶モデルのスーパーセルサイズは、4a×2√3a×3c とした。

【結果と考察】各構造の形成エネルギーを比較したところ、(000-1)面、(0001)面ともに C_{Si}V_C c-axial と C_{Si}V_C basal、V_{Si}V_C c-axial と V_{Si}V_C basal の差はそれぞれ 0.5eV~1.0eV 程度であった。バルク中ではさらに小さくなる。(000-1)面、(0001)面、バルク中すべてにおいて c-axial 構造よりも basal 構造のエネルギーが小さく、これら計算結果は(000-1)面の dry 酸化や(0001)面の酸化で、4 種類の欠陥構造が観測されることを支持するものと考えられる。次に、H 原子が C 原子の未結合手に対して結合した 4 種類の欠陥構造の形成エネルギーを比較したところ、H 原子結合前と欠陥構造間のエネルギー差に有意な違いはなかった。このことより、(000-1)面の wet 酸化における欠陥構造の選択性は、形成エネルギーのみでは説明できないと考えられる。そこで、未結合手に対して H 原子が結合する過程を考えると、C_{Si}V_C c-axial のほうが C_{Si}V_C basal よりも C 原子の未結合手が結晶深部に伸びており、未結合手を終端する H 原子が到達するまでのエネルギー障壁が大きい。また、V_{Si}V_C c-axial よりも V_{Si}V_C basal のほうが未結合手をもつ C 原子が深い位置にあり、H 原子が超える障壁が大きい。よって、H 原子が結合しにくい C_{Si}V_C c-axial、V_{Si}V_C basal が EDMR で観測されやすいと考えられる。講演では、そのエネルギー差と未結合手終端に要するエネルギー障壁について議論する。

【参考文献】 [1] S. Harada *et. al.*, Mater. Sci. Forum **600-603**, 675 (2009)[2] T. Hatakeyama *et. al.*, Appl. Phys. Express **12**, 021003 (2019). [3] T. Umeda Applied Physics Letters **115**, 151602 (2019).