

■受領No.1390

量子論に基づくシミュレーションによる高移動度 SiC-MOS 界面とその創製プロセスの設計

代表研究者

小野 倫也

神戸大学大学院工学研究科 教授



Design of high-mobility SiC-MOS interface and its generation process using first-principles simulation

Principal Researcher

Tomoya Ono,

Graduate School of Engineering, Kobe University, Professor

様々な面方位の SiC-MOS 構造に対し、窒化アニール処理を施した界面の原子構造を第一原理計算で調べた。窒化膜形成エネルギーの観点から a 面を用いた MOS が窒化アニールに適した界面であること、アニールにより導入された N 原子は、SiC 基板の界面第 1 層に窒化膜を形成すること、SiO₂ と窒化膜の間の界面遷移層はアニールの過程で消失することが分かった。また、窒素原子面密度は 10¹⁴~10¹⁵ atoms/cm² であり、二次イオン質量分析法を用いた実験結果とよく一致していることを確認した。

Atomic structure of the 4H-SiC/SiO₂ interface for the a, m, C, and Si faces after NO annealing were investigated by first-principles calculation. Our proposed structures preferentially form at the topmost layers of the SiC side of the interface, which agrees with the experimental finding of secondary-ion mass spectrometry, that is, the N atoms accumulate at the interface. In addition, the electronic structure of the interface after NO annealing, in which the CO bonds are removed and the nitride layer only at the interface is inserted, is free from gap states. Our results imply that NO annealing can contribute to the reduction in the density of interface defects by forming the nitride layer.

1. 研究内容

SiC は次世代パワーデバイス用チャンネル材料として期待されているものの、SiC-MOSFET の移動度は、SiC バルクの移動度に比べて極めて低く、材料の性能を生かしきれていない。酸化プロセス後の NO ガスアニールにより界面欠陥密度を低減することで、移動度が向上するという報告がある。しかし、アニールガス原子の移動度向上に対する役割やアニール後の界面原子構造は明らかになっていない。これまでの実験によると、アニールで導入された N 原子は、SiC の C 原子サイトを置換

し、Si 原子と結合しているという報告がある (R. Kosugi et al., Appl. Phys. Lett. 99, 182111 (2011))。2020 年度は、前述の実験事実に基づき SiC の C 原子サイトを N 原子が置換すると仮定し、計算量縮減のため酸化膜を含まないバルクモデルを用いて、NO ガスアニール後の窒化物の原子構造・電子状態を調べた。そして、a 面が NO ガスアニールに最も適した MOS 界面であるという知見を得た。しかし、酸化膜を含まないモデルでは、酸化膜中の O 原子とアニールにより導入された N 原子との相互作用を正確に考慮できていないという懸

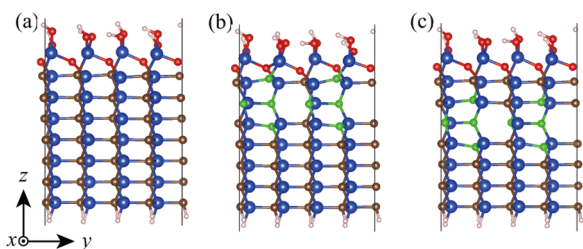


図1: 窒化膜形成計算モデル。(a)アニール前。(b)アニール後に第1層に窒化膜形成。(c)アニール後に第2層に窒化膜形成。青球はSi原子、茶球はC原子、赤球はO原子、緑球はN原子、灰球はH原子である。図はa面界面の例である。

念があった。そこで2021年度は、SiC/SiO₂の酸化膜の影響を考慮するため、バルクモデルよりも原子数が多い界面モデルを用いて窒化物の原子構造・電子状態を解析した。a面、m面、Si面、C面の4種類のSiC/SiO₂界面に対し、NOガスアニール前後の原子構造と全エネルギーを比較した。SiCのC原子がSiO₂のO原子とCO結合する構造も存在しうるため、a面、m面、C面界面では、CO結合を有する界面と有さない界面も比較した。

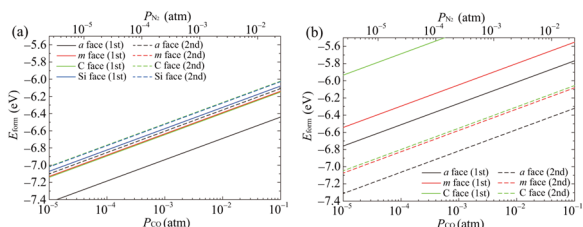


図2: CO分子とN₂分子の分圧に対する窒化膜形成エネルギーの変化。(a)界面にCO結合を有さない場合。(b)界面にCO結合を有する場合。形成エネルギーの低い方が窒化膜を形成しやすい。

図1(a)にa面界面の計算に用いたCO結合を有さないアニール前の界面原子構造を、図1(b)にアニールによりSiO₂直下のSiC層(top)に窒化膜が形成された界面原子構造を示す。このモデルの界面でのN原子面密度は10¹⁴~10¹⁵ atoms/cm²であり、二次イオン質量分析法を用いた実験結果とよく一致している。アニール温度は1000K、NOガスの分圧は1atm、反

応副生成物であるN₂ガス分子とCOガス分子は、それぞれ0.25×10⁻¹~0.25×10⁻⁵atm、10⁻¹~10⁻⁵atmの範囲で化学ポテンシャルを変化させ、窒化膜の形成エネルギーを調べた。

図2に窒化膜の形成エネルギーを示す。a面を用いたSiC/SiO₂界面に形成される窒化膜は、m面、Si面、C面の界面に形成される窒化膜よりも形成エネルギーが低い。この結果は、バルクモデルの計算結果と符合する。このように、界面モデルを用いた計算でも、バルクモデルを用いた計算結果と同様に、a面を用いたMOS界面がNOガスアニールに適しているという結論を得た。次に、SiC/SiO₂界面に原子レベルで平坦な窒化膜層が形成されることを確認するため、窒化膜がSiC/SiO₂界面のSiO₂直下のSiC第1層(top)に形成される場合と、図1(c)のように界面遷移層を挟んだSiC第2層(2nd)に形成される場合の形成エネルギーを比較した。図2(a)にCO結合を有する界面モデル、図2(b)にCO結合を有さない界面モデルの結果を示す。図2(a)に示すように、CO結合を有さない界面ではtop層の形成エネルギーの方が低く、窒化膜はSiC/SiO₂界面に局在することが分かる。これは、NOガスアニールにより導入されるN原子が界面に局在するという二次イオン質量分析法を用いた実験結果と符合する。一方、図2(b)に示すCO結合を有する界面では、遷移層を介して第2層に窒化膜が形成されやすい。これは、第1層に窒化膜を形成する構造ではNとOの結合が界面に作られるが、Si、C、N、Oの中で電気陰性度の高いNとOの結合は電氣的に反発しあい不安定となるため、形成エネルギーが高くなるためである。しかしながら、遷移層を持つNOアニール後界面の報告例は、我々の知る限りない。そこで、遷移層を介して第2層に窒化膜が形成された構造と図1(c)のようにCO結合を有さない界面で遷移層を挟まない構造の形成エネルギーを比較した。図3に示すように、いずれの分圧においてもCO結合除去による形成エネルギーが負となることから、遷移層は容易に酸化され、遷移層を挟

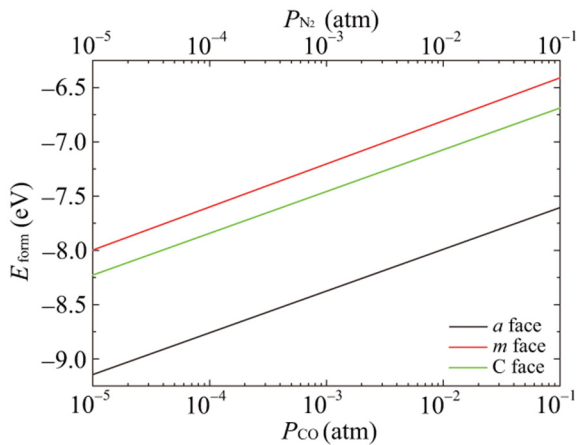


図 3: CO 結合除去に要する形成エネルギー。負の絶対値が大きいほど除去されやすいことを意味する。

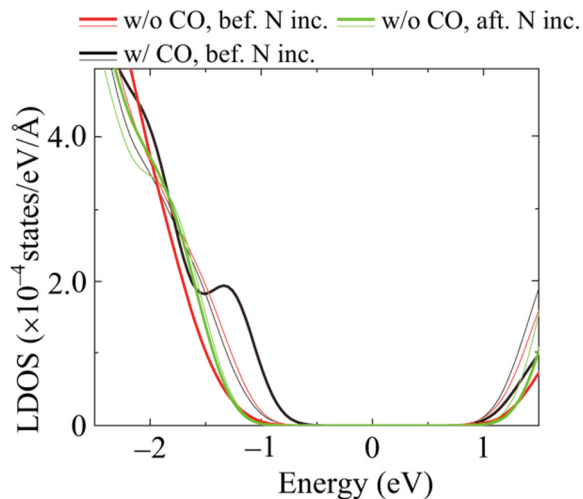


図 4: 界面及び基板深部の局所状態密度。太線は SiC/SiO₂ 界面もしくは SiC/窒化膜界面の SiC 側。細線は、基板深部。CO 結合を有する a 面界面では、SiC の禁制帯中に準位を作る。

まな構造に変化することが分かった。これらの結果より、CO 結合を有する SiC/SiO₂ 界面に形成される遷移層は、アニール時に酸化され消滅するものと予想される。最後に、図 4 に界面及び SiC 基板深部の局所状態密度を示す。アニール処理前の SiC/SiO₂ 界面における CO 結合は、SiC の禁制帯中に欠陥準位を作る。界面における CO 結合が MOS の移動度に及ぼす影響は未解明であるが、NO ガスアニールは、このような禁制帯中に準位を作る構造を減する。

以上のシミュレーションの結果より、NO ガスアニールにより導入された N 原子は SiC 基板の界面第 1 層に局在し平坦な窒化膜を形成すること、CO 結合に起因する界面遷移層はアニール過程で除去されることが明らかになった。

2. 発表 (研究成果の発表)

1. M. Uemoto, N. Komatsu, Y. Egami, T. Ono, “First-principles study on structure and anisotropy of high N-atom density layer in 4H-SiC”, Journal of the Physical Society of Japan, 90(12) 124713 (2021).

2. M. Tsunasaki, T. Ono, M. Uemoto, “Theoretical investigation of vacancy related defects at 4H-SiC (000-1)/SiO₂ interface after wet oxidation”, Japanese Journal of Applied Physics, 61 SH1001 (2022).

3. T. Ono, “DFT study on defects at SiC MOS interface: electronic structure and formation mechanism”, The 3rd International Workshop on Materials Science and Advanced Electronics Created by Singularity (IWSingularity 2022)/The 2nd International Symposium on Wide Gap Semiconductor Growth, Process and Device Simulation (ISWGPDs 2022) (January 11-13, 2022, Nagoya, Japan).

4. M. Tsunasaki, M. Uemoto, T. Ono, “DFT Study on Defect Structures at SiC(000-1)/SiO₂ Interface after Wet Oxidation”, 2021 International Workshop on DIELECTRIC THIN FILMS FOR FUTURE ELECTRON DEVICES (November 14-16, 2021, Online).

5. N. Komatsu, Y. Egami, T. Ono, M. Uemoto, “DFT study on structure and anisotropy of high N-atom density layer in 4H-SiC”, 2021 International Conference on Solid State Devices and Materials (SSDM2021) (September 6-9, 2021, Sapporo, Japan).