

■受領No.1390 (中間報告)

## 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



### 1. 研究目的

SiC は次世代パワーデバイス用チャ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。MOSFET の低い移動度は、MOS 構造作成時の熱酸化プロセスで界面に生成される欠陥が原因であると考えられている。酸化プロセス後に窒素系ガスアニール処理を施すことにより移動度が向上するという報告があるが、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。本研究では、富岳等の超並列スパコンと第一原理計算を駆使したデバイス機能予測・設計シミュレーションを実現すべく、第一原理電子状態・伝導特性計算のための実空間差分法に基づいた計算コード RSPACE の開発と、開発した RSPACE と富岳を駆使した電子状態・伝導特性シミュレーションの実施を目的としている。

### 2. 研究内容

窒素系ガスアニール処理が施された界面原子構造を、RSPACEを用いた第一原理シミュレーションにより探索した。4H-SiCは、Si面[(0001)面]、C面[(000-1)面]、a面[(1-100)面]、m面[(11-20)面]がMOSFETのチャネル材料としてよく使われる。これらの面に対し熱酸化でSiO<sub>2</sub>膜を形成した

表 1. 窒素原子面密度。

結晶面	窒素原子面密度(atom/cm <sup>2</sup> )
<i>a</i>	$1.48 \times 10^{15}$
<i>m</i>	$1.29 \times 10^{15}$
Si(C)	$1.22 \times 10^{15}$

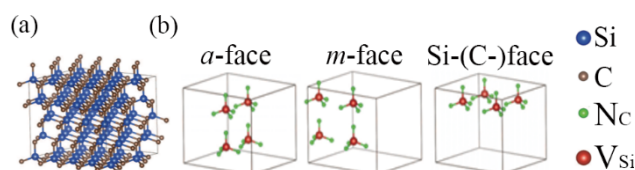


図 1. (a)窒化膜を導入するバルクモデル。

(b)窒化膜形成方向と窒化サイト。

後、窒素系ガスアニールを施した場合、SiC/SiO<sub>2</sub>界面に10<sup>15</sup>個/cm<sup>2</sup>オーダーの高密度で窒素原子が導入されることが分っている。しかしながら、導入後の原子構造については明らかになっていない。そこで、本研究では図1に示すような4H-SiCバルクのSi(C)面方向、a面方向、m面方向に窒素を導入した窒化膜構造を形成し、その窒素原子面密度を評価した。窒化膜は、バルク中からSi原子を1個除去し、Si空孔1個に対し隣接するC原子4個をN原子に置換したものを1つの要素とし、各要素を4つ並べることで界面を模した。4H-SiCのSi原子は、kとhの2種類のサイトがある。それぞれのサイトからSi原子を除去し、窒化膜形成エネルギーを評価した。窒化膜の窒素原子面密度を表1に示す。窒素原子面密度は、実験で観測されているものと

同程度であり、本計算で得られた原子構造は、妥当であると考えられる。

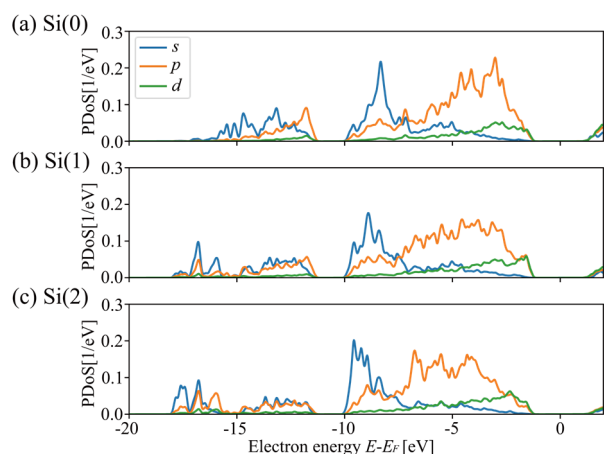


図2. Si原子近傍の局所状態密度。(a)N原子と隣接しないSi原子。(b)N原子1個と隣接するSi原子。(c)N原子2個と隣接するSi原子。窒化膜を導入するバルクモデル。

表3.  $\text{Si}(\text{NH}_2)_n(\text{CH}_3)_{4-n}$ 分子の全エネルギー。

$n$	分子	$E(n)$ [eV]	$\Delta E$ [eV]
0	$\text{Si}(\text{CH}_3)_4$	-1767.216	0.000
1	$\text{Si}(\text{NH}_2)(\text{CH}_3)_3$	-1883.064	-115.848
2	$\text{Si}(\text{NH}_2)_2(\text{CH}_3)_2$	-1999.014	-115.950
3	$\text{Si}(\text{NH}_2)_3(\text{CH}_3)$	-2114.956	-115.943
4	$\text{Si}(\text{NH}_2)_4$	-2230.921	-115.965

表2. 窒化膜形成エネルギーと隣接N原子数を分類に用いたSi原子数。Si(0)は隣接N原子なし。Si(1)は隣接N原子1個。Si(2)は隣接N原子2個。

サイト	面方位	$E_{\text{total}}$ [eV]	$\Delta E$ [eV]	Si(0)	Si(1)	Si(2)
$k$	$a$	-54100.663	0.000	32	8	20
$k$	$m$	-54098.206	0.614	28	16	16
$k$	Si	-54098.368	0.574	24	24	12
$h$	$a$	-54098.737	0.481	28	16	16
$h$	$m$	-54097.280	0.846	14	24	12
$h$	Si	-54097.918	0.686	24	24	12

次に、第一原理全エネルギー計算より、窒化膜形成エネルギーの面方位依存性を調べた。結果を表2に示す。 $k$ サイトのSi原子が除去された場合、 $h$

サイトのSi原子が除去された場合の両方において、 $a$ 面方向に窒化膜が広がる方が安定であることがわかる。窒化膜形成エネルギーの面方位依存性は、Si原子が隣接する窒素原子の数に相関があり、 $a$ 面はN原子2個と隣接したSi原子が他の面に比べて多い。図2に、Si原子のN原子隣接数に対する局所状態密度の変化を示す。N原子の高い電気陰性度によりN原子と結合したSi原子の $sp^3$ 軌道のエネルギーが下がる。その結果、窒化が発熱反応として進む。

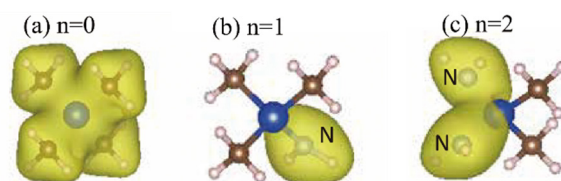


図3.  $\text{Si}(\text{NH}_2)_n(\text{CH}_3)_{4-n}$ 分子の最低エネルギーの $sp^3$ 結合軌道の電子密度分布。

Si原子とN原子の結合が窒化膜形成エネルギーの面方位依存性に与える影響を詳しく調べるため、 $\text{Si}(\text{NH}_2)_n(\text{CH}_3)_{4-n}$ 分子の全エネルギーを計算した。その結果を表3に示す。全エネルギーの変化量は、 $\Delta E = E(n) - E(n-1)$ と定める。 $n=1$ の場合は、窒化によるエネルギー減少幅が小さいが、 $n>1$ では、窒化によるエネルギー減少幅が大きい。図3に最低エネルギーの $sp^3$ 結合軌道の電子密度分布を示す。Nと結合したSi原子では、N原子近傍に $sp^3$ 結合軌道の電子密度分布が局在していることがわかる。1つのN原子としか隣接しないSi原子のSi-N結合は、2つ以上のN原子と隣接するSi-N結合よりも強く局在し、電子の運動エネルギーが大きくなるため安定化しない。このため、2つのN原子と隣接するSi原子数が最大化する $a$ 面が最も安定化する。

以上の結果より、 $a$ 面を使って作成したMOSに窒素系ガスアニールを施せば、原子レベルで平坦なMOS界面を生成でき、高い移動度が期待できることが示唆される。本研究で用いたモデルはSiCバルク中に窒化膜を挿入したモデルであり、酸化膜まで計算モデルに含めたMOS構造でない。今後、酸化膜まで含めたモデルを用いて窒化膜形成に対

する酸化膜の影響を調べ、より現実的な系で評価する。また、第一原理伝導特性計算により、界面に導入された窒化膜構造がキャリア伝導に与える影響について評価し、高移動度MOS界面作成のための指針を得たい。

### 3. 発表 (研究成果の発表)

- ・ Y. Egami, S. Tsukamoto, T. Ono: Calculation of the Green's function in scattering region for first-principles electron-transport simulations, *Phys. Rev. Research* 3, 013038 1-9 (2021).
- ・ A. Hashmi, K. Nakanishi, M. U. Farooq, T. Ono: Ising ferromagnetism and robust half-metallicity in two-dimensional honeycomb-kagome  $\text{Cr}_2\text{O}_3$  layer, *npj 2D Mater. Appl.* 4, 39 (2020).
- ・ 小松直貴, 植本光治, 小野倫也: 4H-SiCバルクにおける窒素添加異方性の第一原理計算, 2020年第81回応用物理学会秋季学術講演会, (Sep. 8-11, 2020, Online, Japan).
- ・ 綱崎夢開, 植本光治, 小野倫也: 第一原理計算によるwet酸化SiC(000-1)/ $\text{SiO}_2$ 界面の欠陥構造解析, 応用物理学会第68回春季学術講演会, (Mar. 16-19, 2021, Online, Japan).
- ・ 植本光治, 小松直貴, 小野倫也: 4H-SiC MOSにおける窒素添加の第一原理計算, 日本物理学会2020年秋季大会, (Sep. 8-11, 2020, Online, Japan).