

【富岳ミーティング説明資料】

2021/7/15  
富士電機(株)  
先端材料技術研究部

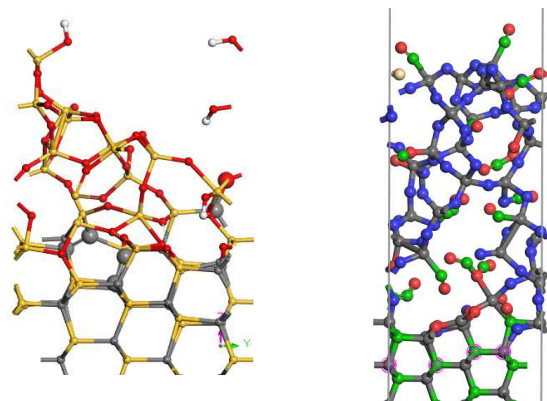
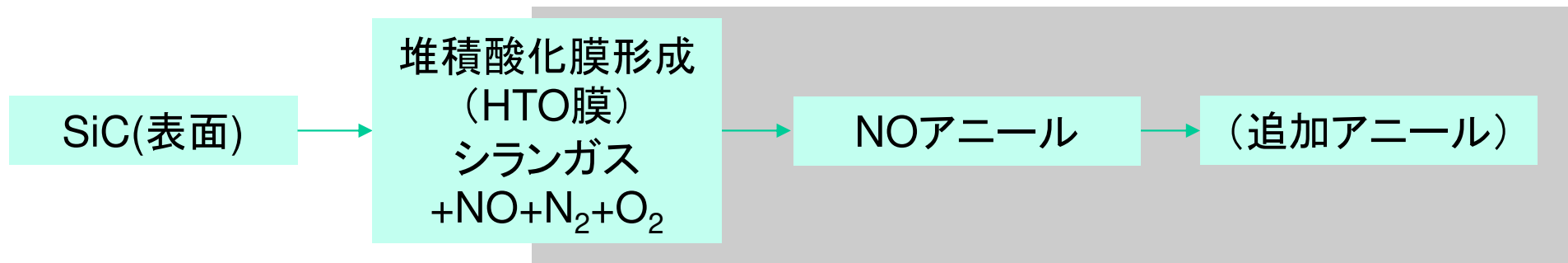
## 富士電機の取組み

### -アモルファスSiO<sub>2</sub>中N不純物欠陥の解析-

承認	審査	作成
		

- 次世代SiCデバイス量産プロセスでの適用を目指して、SiC/SiO<sub>2</sub>界面～SiO<sub>2</sub>膜中欠陥構造の同定、ガスとの反応性を比較・解析したい

## デバイス作製プロセスと反応計算の関係



これまで

- SiC表面に対する酸化、酸窒化反応  
⇒欠陥の構造、位置、不純物準位

プロセス条件最適化の  
事前検討として反応計算を使いたい

↓  
表面反応から進んだ環境での反応計算

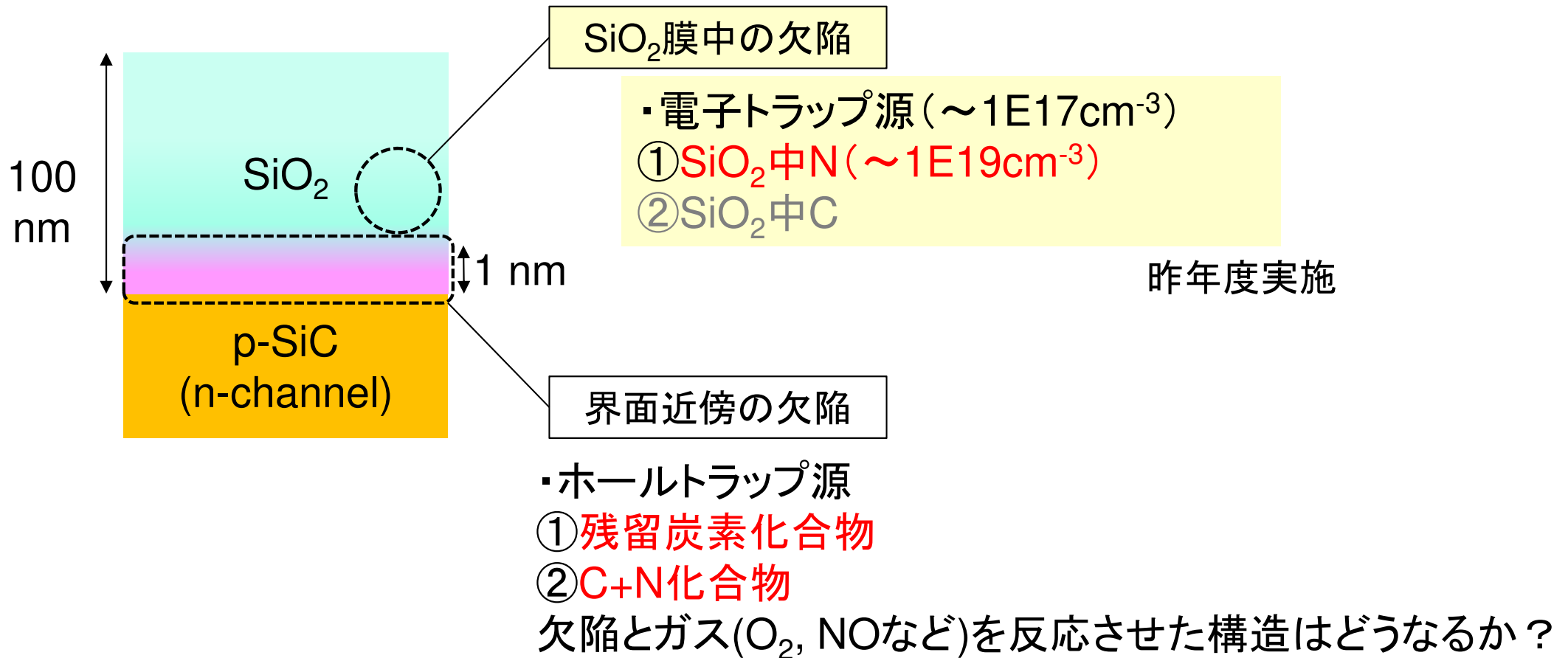
不要な欠陥を消しつつ、新たな欠陥の生成を抑える条件(ガス種、温度、添加物など)を知りたい。  
SiO<sub>2</sub>中にC,N欠陥のある大規模な界面系の反応計算で、ヒントが得られないか。

## 特に注目している欠陥

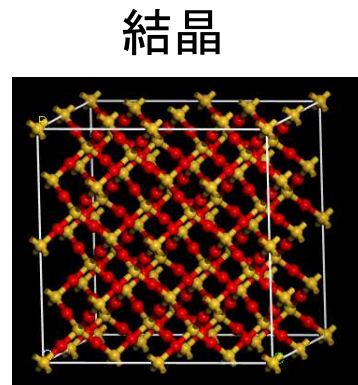
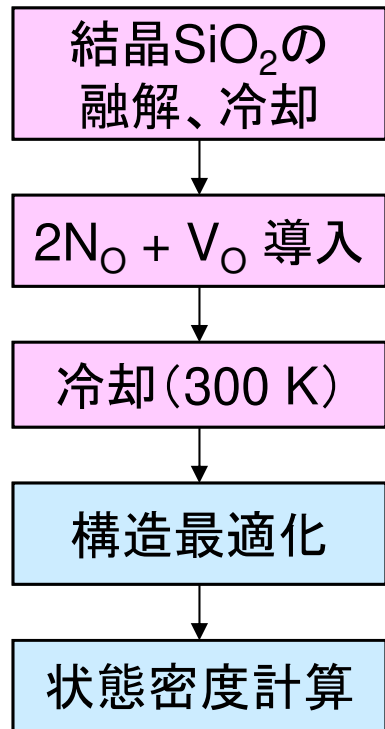
Confidential

- ・絶縁膜中の欠陥による電子トラップ、界面近傍の正孔トラップに注目。
- ・スイッチ動作中の経時劣化(しきい値電圧の正シフト)の原因としての電子トラップ

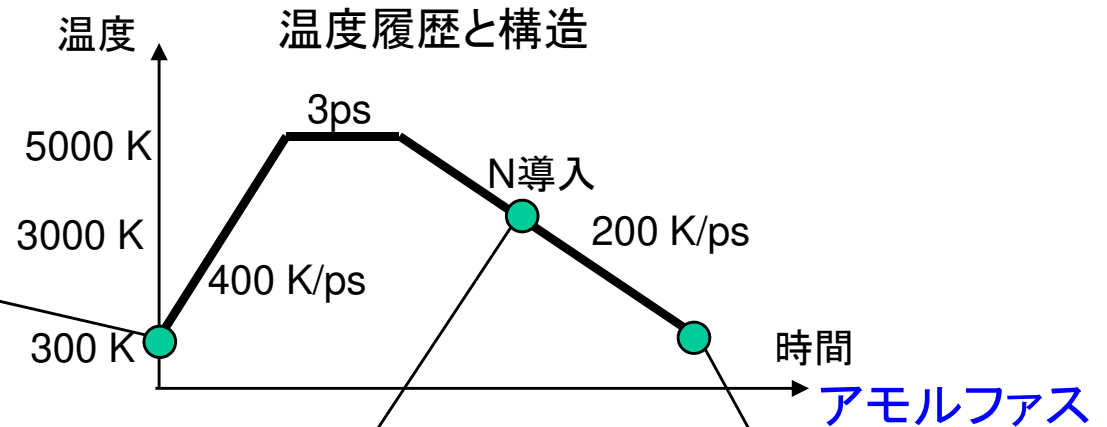
### 界面からの位置と注目している欠陥の関係



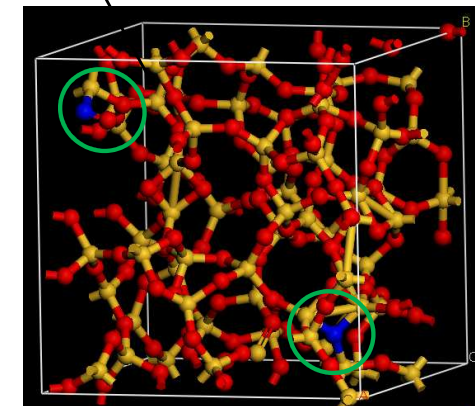
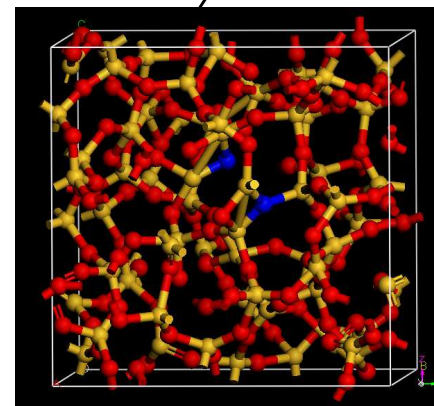
マルチエンチ法でアモルファス構造+不純物(N)を作製



β-クristバライト  
原子数 192  
(2\*2\*2 超格子)  
密度 2.17g/cm<sup>3</sup>



●:Si  
●:O  
●:N



MD計算

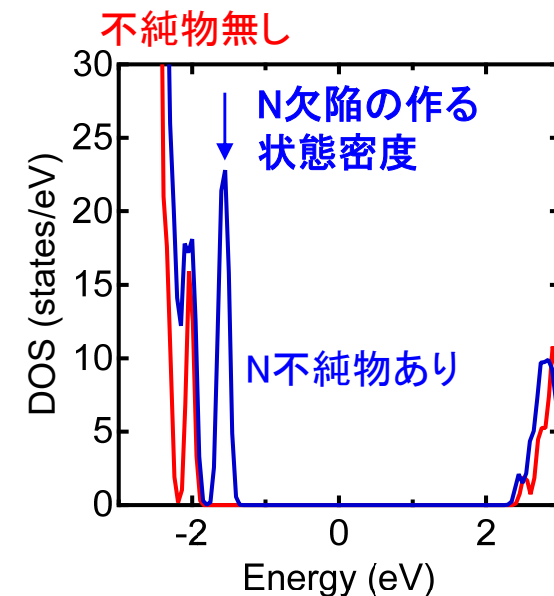
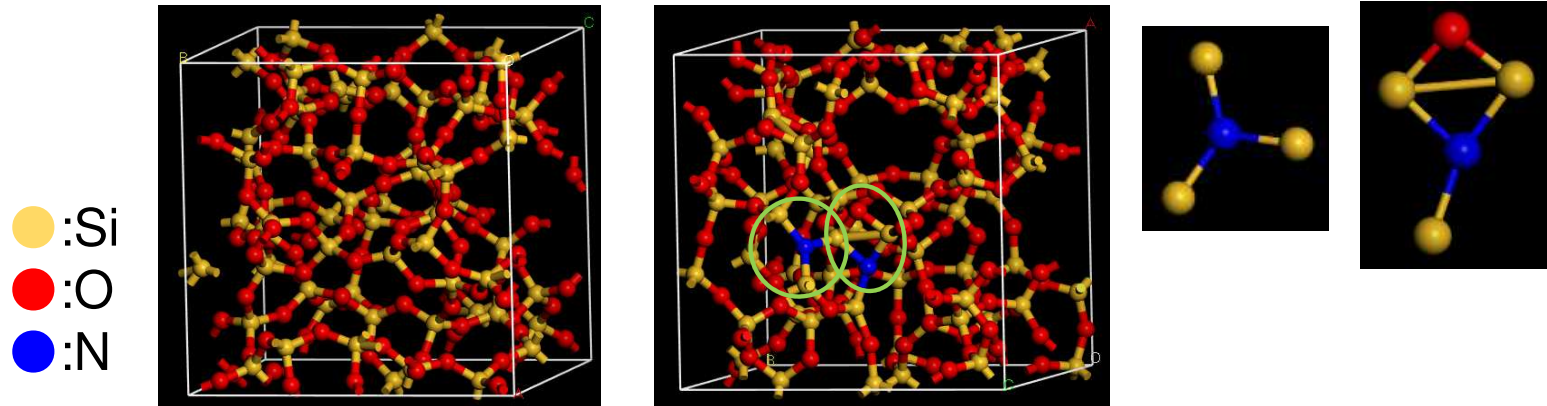
計算コード RSDFT  
汎関数 GGA-PBE  
N不純物導入温度 5000 K ~ 2000 K

構造最適化、状態密度計算

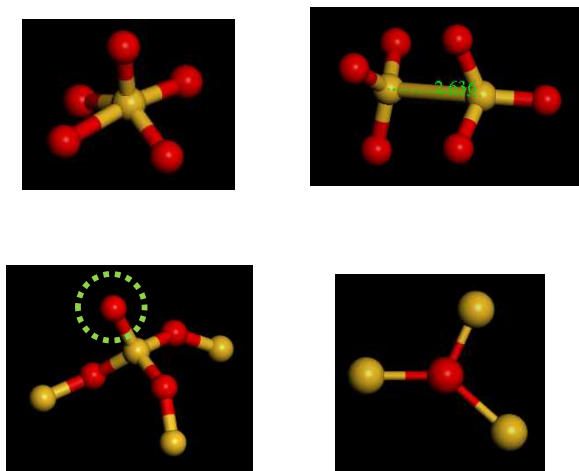
計算コード Quantum ESPRESSO (v.6.4)  
汎関数 GGA-PBE  
k点 1\*1\*1  
スピン 有

Confidential

- ・ 導入温度やN導入位置を変えると異なる欠陥構造が生成
- ・ 頻出する構造:  $\text{Si}_3\text{N}$ ,  $\text{SiONSi}$ のSi二員環構造など
- ・ 比較的浅い正孔トラップを形成⇒電子トラップにはならず



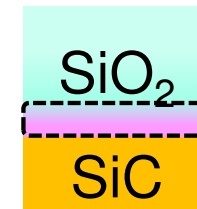
- ・ Nを含む系では降温過程でSi-Oからなる欠陥構造も生成
- ・ 結合の乱れが起こりやすくなっている可能性 (間接的な悪影響を示唆)
- ・ 実験的にはN濃度に電子トラップがほぼ依存しないことが判明 ⇒ Nが主要因とは考えにくいと判断  
界面付近のCによる影響を検証中



Confidential

## ➤ 界面の欠陥推定

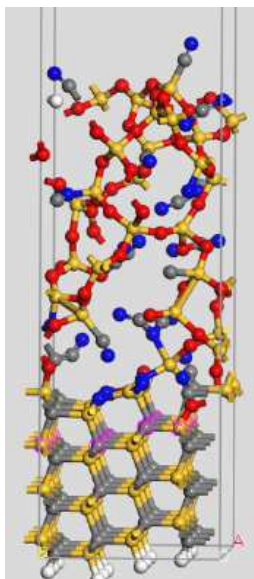
- SiC(m面)/SiO<sub>2</sub>界面でのNOガスによる欠陥構造の抽出
- 大規模な系での状態密度計算  
→ C + N が作る欠陥の輸送特性への影響を解析
- C + N欠陥とガスの分解反応の解析  
→ 欠陥分解メカニズムの推定



NOガス処理後の更なる特性改善を目指す

これまでの手法  
(200原子)

● :Si  
● :O  
● :C  
● :N  
○ :H



より大きな界面  
(800~2000 原子)  
の中での欠陥構造、  
状態密度、  
ガスとの反応

