

SiC表面における酸化初期過程に関する理論的研究

Theoretical Investigation for Initial Oxidation Processes on SiC Surfaces

三重大院工¹, 名大院工², 島根大院理工³, 慶大理工⁴○伊藤 綾子¹, 秋山 亨¹, 中村 浩次¹, 伊藤 智徳¹, 白石 賢二², 影島 博之³, 植松 真司⁴Mie University¹, Nagoya University², Shimane University³, Keio University⁴,○Ito Ayako¹, Toru Akiyama¹, Kohji Nakamura¹, Tomonori Ito¹, Kenji Shiraishi²,Hiroyuki Kageshima³, Masashi Uematsu⁴

E-mail: 413M604@m.mie-u.ac.jp

【はじめに】SiCは、高出力、高周波数および高温で動作するパワーデバイスへと適用可能なワイドギャップ半導体として注目されている。さらに、SiCはSiと同様に熱酸化によって熱酸化によってSiO₂絶縁膜が得られることから、MOSFET等の電子デバイス作製において他のワイドギャップ半導体にはない利点がある。SiC熱酸化での酸化膜形成機構に関しては、これまでに酸化膜とSiCとの界面によって発生するカーボンオキシドの反応とその酸化膜内での拡散の重要性が指摘されているものの[1]、その形成機構に関しては酸化膜形成速度の面方位依存性を含め不明な点が多い。これまでに我々はSiC熱酸化におけるカーボンオキシド(COおよびCO₂)の拡散機構の理論検討を行い、分子状のカーボンオキシドがSiO₂格子内を拡散していく過程を明らかにした[2]。本研究では、SiC表面での酸化反応に注目し、酸素の吸着によるSiC表面の構造変化を明らかにする。特に、酸素の吸着に伴うSi原子およびC原子の脱離の可能性を検討し、表面構造変化の面方位依存性を議論する。

【結果および考察】図は、表面再構成を考慮した($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Si面および(2×2)-C面[3,4]におけるSiC表面での酸素の吸着に伴うC原子のCO分子としての脱離エネルギーを示したものである。この図から、Si面では酸素の被覆率の増加に伴い脱離エネルギーが増加する傾向がみられ、表面からC原子は脱離しないことが分かる。さらにSi面では、酸素の被覆率の増加に伴い酸素の吸着エネルギーも小さくなり、1ML以上では酸化が進み難くなる。一方、C面では0.25および1MLの酸素が吸着した表面において脱離エネルギーが負となり、CO分子としての脱離が容易に起こることが分かる。これは、C-O bond (8.76eV/atom) よりも Si-O bond (9.77eV/atom) のエネルギーが高いため、C原子が最表面に位置するC面においては、Si-O bondを形成するようにC原子の脱離が起こるためであると考えられる。以上の結果は、酸化初期過程においても、C原子の脱離が起こりやすいC面において酸化膜が容易に形成され得ることを示唆している。

[1] Y. Song et al.: JAP **95** (2004) 4953.[2] T. Akiyama et al.: JAP **113** (2013)

184312. [3] M. Sabisch et al., Phys. Rev. B

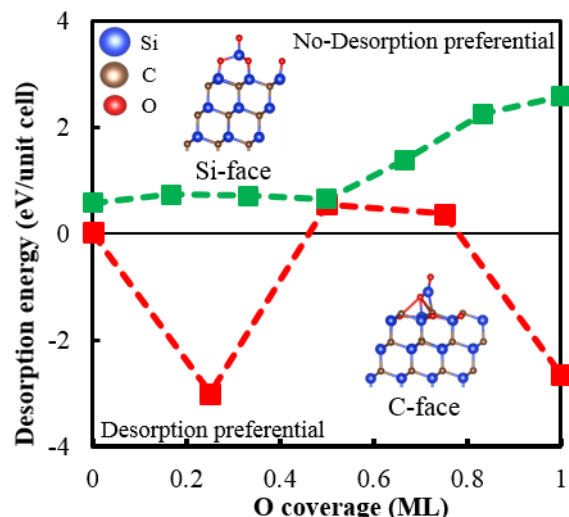
55 (1997) 10561. [4] A. Seubert et al., Surf.Sci. **454** (2000) 45.

Fig: Desorption energy of carbon as CO molecule as a function of oxygen coverage on SiC surfaces. Red and green lines denote desorption energies on C- and Si-faces, respectively. Schematic side views of surface structures with 1ML of O atoms are also shown.