

4H-SiC(0001)表面酸化過程の動的シミュレーションおよび第一原理解析

物材機構¹, 高効率電デバコンソーシアム², 高度情報³, (株) 東芝研究開発センター⁴,
東大生産研⁵ ○山崎隆浩^{1,2}, 小山洋^{2,3}, 奈良純^{1,2}, 清水達雄⁴, 加藤弘一⁴, 大野隆央^{1,2,5}

Dynamical Simulations and First-Principles Analyses of Oxidation Processes on
4H-SiC(0001) Surfaces

NIMS¹, MARCEED², RIST³, Toshiba R&D Center⁴, IIS, Univ. of Tokyo⁵

T. Yamasaki^{1,2}, H. Koyama^{2,3}, J. Nara^{1,2}, T. Schimizu⁴, K. Kato⁴, and T. Ohno^{1,2,5}

E-mail: YAMASAKI.Takahiro @nims.go.jp

SiC 基板にいかに良質な酸化膜を形成するかということは、高耐圧大電流のパワーデバイスを実用化するための重要な課題である。われわれはこれまで 4H-SiC(0001)Si 面、(000-1)C 面にそれぞれ SiO₂ 膜を整合的に重ねた構造を作り、界面近傍の SiO₂ 領域に O₂ 分子を導入したあと昇温し反応させ、それぞれの酸化反応を観察し、C 面の反応性が高い理由を考察してきた[1]。

今回、理想表面上に O₂ 分子を連続的に供給したとき面方位によって酸化反応がいかに異なるかを、古典的分子動力学 (MD) シミュレーションを用いて観察した。特徴的な反応過程については第一原理計算プログラム PHASE[2]を用いて解析した。面方位は、(0001)Si 面、(000-1)C 面のほかに(11-20)A 面を考えた。MD 用ソフト LAMMPS で ReaxFF 古典力場[3]を用いて、5 から 25 個の真空領域に保持した O₂ 分子を 30~20 ピコ秒間隔でひとつずつ放した。温度は 1300K に制御した。その結果、いずれの表面でも O₂ 分子は表面 Si と結合したあと解離し、SiC の酸化が始まった。C 面では、温度の効果により最表面の一部の原子が変位し二層目の C 原子との結合がつながり変わり (C-C 結合が発生) Si 原子が露出することがあり、その瞬間に衝突した O₂ 分子との結合が生じる (Fig.1)。C 表面において一部の Si 原子が露出する (Fig.2) 構造は、第一原理計算によると理想表面に比較して 0.76 eV 不安定であったが、SiO₂ 層を重ねるとその損分を相殺して余りあることが分かった。これらのことから、C 面の酸化では SiC 基板側に C-C 結合がより多く発生する傾向が現れると考え得る。なお本研究は文部科学省高性能汎用計算機高度利用事業「HPCI 戦略プログラム」分野 4 次世代ものづくりの補助を受け実施された。

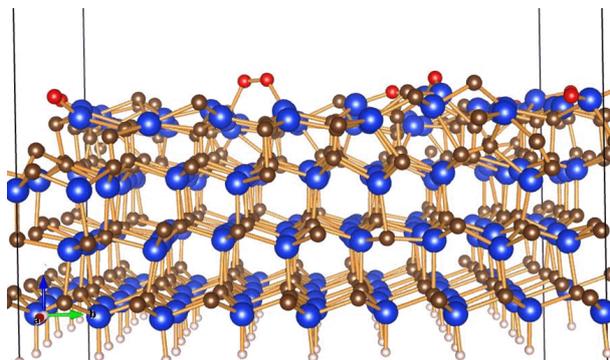


Fig.1 A snapshot of 4H-SiC(000-1) C-face oxidation at 120 ps. Red, blue and brown balls are O, Si, and C atoms, respectively. The back surface is terminated with H atoms.

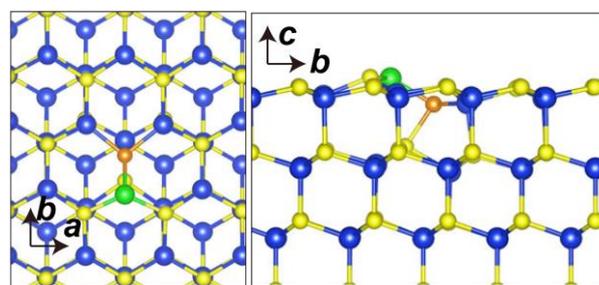


Fig.2 An arranged surface of the C-face, where a pair of surface Si and C is moved. The Si is raised and the C is lowered to make a bond with the 2nd-layer C atom. Yellow and orange balls are C atoms, and blue and light-green ones are Si atoms.

[1] 小山、山崎、奈良、清水、大野、応用物理学会 2014 年春 17a-PG3-7.

[2] <https://azuma.nims.go.jp/> からダウンロード可。 [3] D. A. Newsome et al., Journal of Phys. Chem. C **116** (2012) 16111.