17a-PG3-7

4*H*-SiC(0001)Si 面及び(000-1)C 面、 それぞれの酸化反応の動的シミュレーション

Molecular Dynamics study on oxidation processes on 4*H*-SiC(0001) and (000-1) surfaces



物質・材料研究機構¹, 高効率電子デバイス材料研究コンソーシアム², 株式会社東芝 研究開発センター³, 東大生産研⁴ ⁰小山 洋^{1,2}, 山崎 隆浩^{1,2},奈良 純^{1,2}, 清水 達 雄³,大野 隆央^{1,2,4}

NIMS¹, MARCEED (Materials Research Consortium for Energy Efficient Electronic Devices)², Toshiba R&D Center³, IIS Univ. Tokyo⁴, [°]Hiroshi Koyama^{1,2}, Takahiro Yamasaki^{1,2}, Jun Nara^{1,2}, Tatsuo Schimizu³, Takahisa Ohno^{1,2,4}

E-mail: KOYAMA.Hiroshi@nims.go.jp

パワーデバイスへの応用が期待される 4H-SiC の酸化絶縁膜の成長は(0001)Si 面に比べて (000-1)C 面の方が 10 倍近く速いことが知られて いる[1]。我々はこの酸化反応の界面に依る相違を 明らかにする為に分子動力学(MD)シミュレーシ ョンを行った。4H-SiC(0001)Si 面、(000-1)C 面そ れぞれに 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、1,000~ 1,600 K に昇温した。Si 面のシミュレーションで は O₂分子は解離し SiO₂相に取り込まれたが SiC との界面構造に変化を起こさなかった。これに対 し C 面のシミュレーションでは O2分子が解離・ 吸収され一旦5配位のSi結合を作るが(Fig. 1b)、 後に界面の Si-O-C≡Si₃配位をしていた O 原子の 結合を切り、4 配位の Si に戻った(Fig. 1c)。Si との結合を切られた O 原子は基板側の Si-C 結合 中に侵入した(Fig. 1c)。C面の反応が速い理由の一 つは界面に構成されている Si-O-C 結合の Si-O 結 合が、Si 面の Si-O-Si 結合に比べて切れやすいこ とが考えられる。

計算は分子動力学ソフトLAMMPSでReaxFF 古典力場[2]を用いて行った。計算の初期状態とし ては 4H-SiC(0001)および(000-1)面それぞれに SiO₂(β トリデマイト相)の薄膜を整合的に配置し、 上下の表面のダングリングボンドを全て水素で 終端した。ReaxFF 力場にて構造緩和した後に、界 面近傍の SiO₂領域に O₂分子をひとつ配置してこ れを MD の初期条件とした。温度は Nose-Hoover 法により制御した。 Fig 1.(c)の構造から界面の CO を脱離させて O を吸着させた構造を作り第一原理計算プログラム PHASE[3]を用いて電子状態計算を行ったところ、7-9 eV 得をすることが分かった。



Fig. 1 4*H*-SiC(000-1) C-face oxidation after 10 picoseconds with temperature control at 1,000 K. Blue, Yellow, and Red balls are Si, C, and O atoms, respectively. Green balls denote initially imposed oxygen.

 L. Muehlhoff, M. J. Bozack, W. J. Choyke, and J.T. Yates, J. Appl. Phys. 60, 2558 (1986)

[2] D. A. Newsome, D. Sengupta, H. Foroutan,M. F. Russo, and A. C. T. van Duin, The Journal of Physical Chemistry C 116 (2012) 16111

[3] http://www.ciss.iis.u-tokyo.ac.jp