18a-E5-1

4H-SiC 表面酸化機構の酸化温度と酸素分圧による違いの理解

Comprehensive understanding of 4H-SiC surface oxidation reaction mechanisms at various conditions

[1] 東京大学大学院工学系研究科 マテリアル工学専攻, [2]JST さきがけ
○喜多 浩之 [1,2], 菊地リチャード平八郎 [1], 平井 悠久 [1]
[1]Dept. of Materials Engineering, The Univ. of Tokyo, [2]JST-PRESTO, °K. Kita[1,2], R. H. Kikuchi[1], and H. Hirai[1]
E-mail: kita@scio.t.u-tokyo.ac.jp

[背景と目的] SiC/SiO_2 界面の高品質化のためには、SiC の熱酸化の機構の理解と制御が重要である。我々は、膜厚が 10 nm 程度の薄膜領域では界面反応律速で酸化が進行し、副生成物の CO が膜中を拡散して脱離する過程は十分に速いことを見出した[1]。しかし、理想的に界面反応で CO が直接生成するための酸化温度や酸素分圧(pO_2)は限定されることに注意が必要である。Song らは、非平衡な界面で支配的なのは Gibbs の自由エネルギー変化−ΔG が最大の反応であるとの仮定から、SiC と O_2 の固気界面で生じる反応を、高温・低 pO_2 でアクティブ酸化 SiC+O_2→SiO↑+CO↑(反応 1)、中庸な条件で理想的なパッシブ酸化 SiC+3/2O_2→SiO_2+CO↑(反応 2)、低温・高 pO_2 では固相に C を残す反応 SiC+O_2→SiO_2+C(反応 3)と予想した[2]。逐次的に C は CO へ、SiO は SiO_2 へ酸化されるが、上記 1~3 はそこへ至る経路に関する区分である。SiO_2/SiC の固相界面においても、上記の SiC-O_2 固気反応の駆動力の大小関係が定性的に適用できる。ただし実際の系では、反応のエネルギー障壁が速度を制約するため、各反応の境界は実験的に決定する必要がある。

[実験] 基板にはオフ角 4° ウェーハ上に n 型エピタキシャル層(ドープ濃度 1～3×$10^{16}$$cm^{-3}$)を有する 4H-SiC の Si 面、及び C 面ウェーハを用いた。N_2 希釈により O_2 濃度を 2%、20%、100%と変えながら、ランプ加熱炉中で 940°C~1300°C で酸化を行った。成長膜厚を X 線反射率法によって求め、その酸化時間依存性から 2～15 nm の膜厚領域において、界面反応律速下の直線的な成長過程から成長速度を決定した。

[結果および考察] 1 atm O_2 中での Si 面及び C 面上の酸化速度の温度依存性を Fig. 1 に示す。活性化エネルギーE_A は、Si 面上で 3.8±0.1 eV[1]、C 面上で 1.6±0.05 eV となった。この明確な差は、支配的な反応過程が異なることを示す。Si 面上の高い E_A は界面から CO がカルボニル構造を経て脱離する過程の計算結果とも整合し[3]、反応 2 に対応すると考えて説明がつく。一方、C 面上で観察される低い E_A は低温側で優勢な過程であることを意味し、例えば反応 3 の表面反応と同様、C を何らかの形で固相側に残しながら進行する酸化過程が支配していると示唆される。つまり C 面上では、Si 面上に比べて後者の過程を生じる頻度が高くなっており、本実験条件下では CO の直接的な脱離よりも速度が勝ると考えられる。この仮説では、より高温・低 pO_2 とすれば C 面でも反応 2 が優勢となるはずである。その実証のため、pO_2 を変えて成長速度を調べた結果を Fig. 2 に示す。Si 面の酸化ではおよそ pO_2 の 0.5 乗に比例するのに対し、C 面は温度によって異なる振る舞いを示した。低温では pO_2 の 1.0 乗に比例し、Si 面とは全く異なる振る舞いである。しかし高温・低 pO_2 側となるに従って pO_2 の 0.5 乗に近づき、C 面上でも徐々に Si 面と同様の反応過程が支配的となると解釈できる結果である。尚、反応次数が 0.5 と 1.0 に見える理由は明確ではないが、逐次的に生じる反応素過程のうち、律速過程が消費するのが O 原子か、O_2 分子かの違いに対応すると理解するのが自然である。

[1] 菊地ら, 2013 年秋季応物学会 17a-B3-6. [2] Y. Song and F. W. Smith, *APL* 81, 3061 (2002). [3] A.Gavrikov et al., *JAP* 104, 093508 (2008).

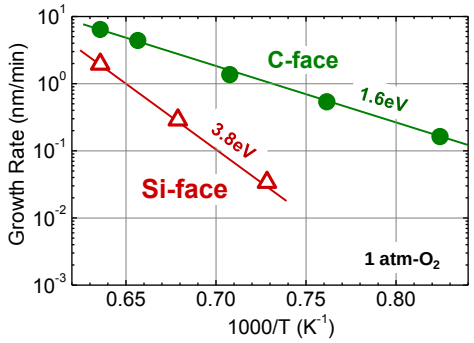

Fig. 1 Oxide growth rate on 4H-SiC Si-face and C-face in 1 atm-O_2 at various temperatures.

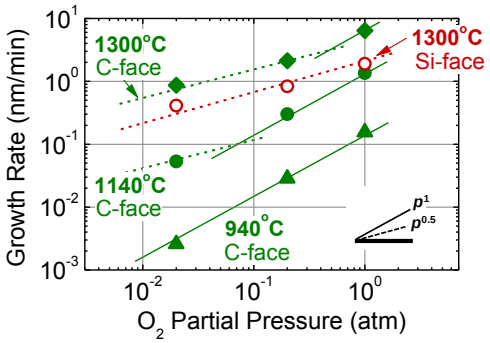

Fig. 2 pO_2 dependence of oxide growth rates for Si-face (1300°C (○)) and C-face (940(▲), 1140(●), and 1300°C (♦)).

© 2014 年　応用物理学会