

シリコン・カーバイド熱酸化プロセスに関する第一原理的研究

A first principles study on the process of silicon carbide thermal oxidation

物材機構¹, 高効率電子デバイス², 東芝研究開発センター³, 東大生産研⁴

山崎隆浩^{1,2}, 田島暢夫^{1,2,4}, 金子智昭^{1,2}, 奈良純^{1,2}, 清水達雄³, 加藤弘一³, 大野隆央^{1,2,4}

NIMS¹, MARCEED², Toshiba R&D Center³, IIS, Univ. of Tokyo⁴

T. Yamasaki^{1,2}, N. Tajima^{1,2}, T. Kaneko^{1,2}, J. Nara^{1,2}, T. Schimizu³, K. Kato³, T. Ohno^{1,2,4}

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

SiC 基板を使ったパワーデバイスの研究開発は低消費電力化社会の実現のために非常に重要である。SiC 系パワーMOSFET 作成にはいくつかの技術課題があり、最重要課題の一つは、高チャネル移動度を獲得するために欠陥の少ない SiC/SiO₂ 界面を形成することである。SiC の熱酸化は SiC/SiO₂ 界面を形成するための代表的な方法である。形成界面に不要な化学種を残さないプロセス条件が調べられている一方、電気的特性劣化に寄与する界面の化学構造的要因についても検討が進められている。

本研究では、SiC の熱酸化プロセスにおいて中間的に生成される化学種・化学構造について知見を得るために、第一原理分子動力学計算に基づく検討を行った。

SiC(000-1)面(C 面)および(0001)面(Si 面)の上にトリジマイト構造の SiO₂ を乗せて SiC/SiO₂ 界面のモデル構造を作成した (Fig.@1)。C 面のモデル構造は、既報[1]のように、SiC 最上部のバイレイヤーの Si 原子と C 原子が入れ替わった構造である。清浄な C 面では第 2 層の Si 原子の半分が最表面に現れ、(2x1)p-結合鎖の構造を取ってエネルギー的に安定化する。SiO₂ との界面では、さらにすべての Si 原子が最表面に現れて強い Si-O 結合を形成し界面が安定化するのである。C 面、Si 面、それぞれの界面付近に O 原子を逐次的に供給し、構造を分子動力学的に緩和した (各 ~2 ps 程度、 $T = 1273$ K、 $dt = 1$ fs)。電子構造計算には PBE 汎関数/ウルトラソフトポテンシャルを使用した。平面波とエネルギーのカットオフはそれぞれ 25 Ry. と 225 Ry.とした。計算にはプログラム PHASE[2]を使用した。

現時点で、~ 20 個の O 原子(バイレイヤーSi(C)原子の約 2 倍の個数)を供給した。この段階までは、供給された O 原子は界面付近の SiC の Si 原子に優先的に結合する。これに伴って結合の相手を失った C 原子は互いに結合して炭素クラスターを生成する。詳細は当日報告する。

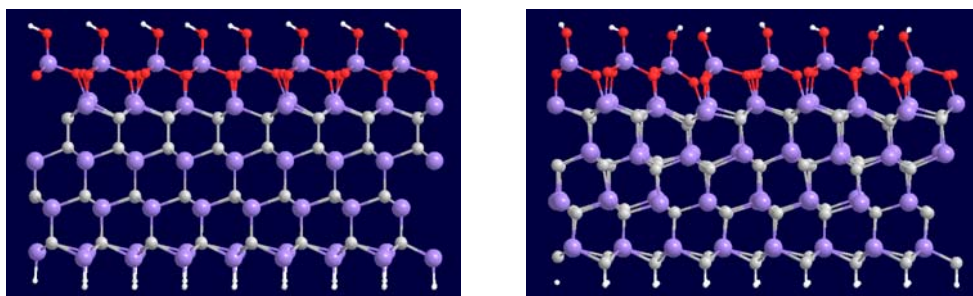


図1. 計算に用いた SiC(000-1)/SiO₂界面のモデル構造(左)および SiC(0001)/SiO₂界面のモデル構造(右)。並進像を含めて左右2倍にして表示。モデル下端と上端のダングリングボンドは水素原子で終端。紫(Si), 灰色(C), 赤(O), 白(H)。

謝辞: 本研究は HPCI 戦略プログラム(分野 4)の支援を受けて行った。計算には京計算機を使用した。

[1] 山崎,田島,金子,西川,清水,加藤,大野 応用物理学会 2014 年春 13a-B4-3.

[2] <https://azuma.nims.go.jp> からダウンロード可。