

SiC/SiO₂ 界面モデリングのための ダイナミックボンドオーダー・ポテンシャルの開発

Development of Dynamic-Bond-Order Potential for SiC/SiO₂ Interface Modeling

早大理工¹ ○橋本 修一郎¹, 渡邊 孝信¹

○S. Hashimoto¹ and T. Watanabe¹ (1.Waseda Univ.)

E-mail: shuichiro.h@aoni.waseda.jp

【はじめに】SiC は、その強固な原子間結合に由来する高耐圧性からパワーデバイス材料として有望視されており、既に実用化も始まっている。SiC パワーMOSFET の性能を左右する酸化絶縁膜界面の欠陥密度は、SiC 表面を酸化した際に生じる余剰 C 原子の挙動に依存することが知られている^[1]。近年では、余剰 C 原子が CO 気体分子として脱離するよう酸化条件を最適化することで、界面準位密度を大幅に削減したという報告がされている^[4]。そのため、SiC/SiO₂ 界面における余剰 C を含む原子分子の挙動の理解が欠陥低減を目指す上で極めて重要な基礎研究と言える。

酸化膜のようなアモルファスの構造との界面を計算機上で再現するには大きなユニットセルを構成する必要があるため、SiC/SiO₂ のシミュレーションを実施するには、扱える原子数が大きい古典的分子動力学(MD)法が適している。これまで当研究グループでは、Si-O および Ge-O 混在系用の拡張型 Stillinger-Weber (SW)ポテンシャル関数を開発し Si/SiO₂ 界面、Ge/GeO₂ 界面の大規模モデリングを実施してきた^[5]。同様のアプローチで SiC/SiO₂ 界面のシミュレーションを行うためには Si-C-O 混在系用のパラメータセットを用意する必要があるが、拡張 SW ポテンシャルを3元素以上の多元素混在系に拡張することは極めて困難であった^[6]。

共有結合性の相互作用ポテンシャル関数を多元素系へ拡張するには、原子間の結合次数(ボンドオーダー)の定義と相互作用エネルギーを定義する仕組みを明確に分ける必要がある。ボンドオーダーを意識したポテンシャルには、Tersoff ポテンシャル^[7]、Brenner ポテンシャル^[8]が有名である。近年では多元素系へ拡張性を一挙に高めた ReaxFF^[9]が登場し、当グループではさらに拡張性を高めたダイナミックボンドオーダー力場(DBO-FF)を考案した^[10]。

本研究では、DBO-FF の枠組みで Si-C-O 混在系ポテンシャルを実現し、SiC/SiO₂ 界面の大規模モデリングを実施した。

【計算方法】DBO-FF では、SW ポテンシャルと同様に、結合エネルギーを表す2体項と結合角の歪を表す3体項といった原子クラスターのエネルギーに展開し、原子間の全相互作用エネルギーを決める。ただし、2体項および3体項が適用される原子クラスターは、原子間のボンドオーダーが一定値を超えたものに限定され、DBO-FF ではこのボンドオーダーが各原子の内部自由度によって決まる仕組みとなっている。この内部自由度は、外殻電子の空間分布つまり結合手そのものに相当する。従来手法では、原子座標で一意的に決定されていたボンドオーダーが、本手法では運動する力学変数として扱われるため、ボンドオーダーと相互作用エネルギーの決定プロセスが完全に分

離され、3元素以上の複雑な系への拡張を容易にしている。

Si-C-O 混在系における2体および3体項のパラメータは、Si_wC_xO_yH_z クラスターモデルの第一原理計算に基づいて決定した。SW 型の2体項および3体項のパラメータは、クラスターモデルの第一原理計算結果にフィッティングした。得られたパラメータセットを用いて4H-SiC 構造を表面から layer-by-layer 酸化し、SiC/SiO₂ 界面モデルを作成した。

【計算結果】Fig 1 に、DBO-FF 用に決定した Si-C 2体項および Si-C-Si 3体項のエネルギー曲線を示す。同様に Si-Si、Si-O、O-O、O-C、C-C の2体項群、C-Si-C をはじめとする3体項群のパラメータも同様に用意した。Fig 2 は、開発した Si-C-O 混在系用 DBO-FF を用いて作成した SiC/SiO₂ 界面モデルを示す。元素の組み合わせに応じて用意すべき2体項および3体項のパラメータは増加するが、それぞれ完全に独立で決定できるため、従来のポテンシャルのように一度決定したパラメータを再調整する必要がない。

講演会当日は、従来法による SiC/SiO₂ 界面のシミュレーションとも比較を行い、DBO-FF の得失を議論する。

【謝辞】本研究は科学研究費補助金・基盤研究 B(15H03979)の支援を受けて行われた。

【参考文献】[1] S. Wang, et al., Phys. Rev. Lett. 86.26 (2001). [2] B. Hometz, et al., J. Mater. Res. 9.12 (1994). [3] Fukuda, K., et al., Appl. Phys. Lett. 77.6 (2000). [4] R. H. Kikuchi, et al., Appl. Phys. Lett. 105.3 (2014). [5] T. Watanabe, et al., ECS Trans. 33.6, 901-912 (2010). [6] J.D. Torre, et al., J. Appl. Phys., 92, 1084 (2002). [7] J. Tersoff, Phys. Rev. Lett., 56, 632 (1986). [8] D. Brenner, Phys. Rev. B, 42, 9458 (1990). [9] W. A. Goddard, III et al., J. Phys. Chem. A105, 9396 (2001). [10] T. Watanabe, J. Comp. Electron. 10, 2 (2011).

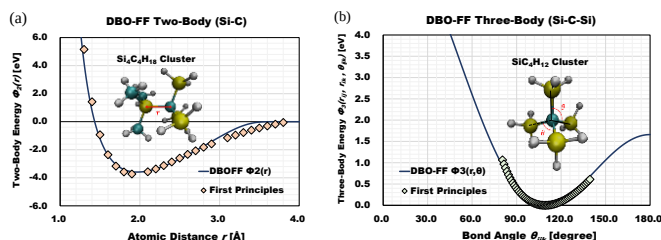


Fig 1 Energy curves of DBO-FF potential for Si-C-O mixed system (a) Si-C two-body (b) Si-C-Si three-body.

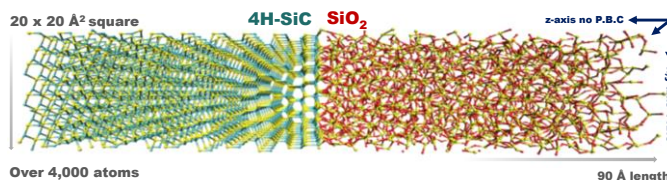


Fig 2 4H-SiC/SiO₂ interface model (layer-by-layer oxidized by DBO-FF potential for Si-C-O mixed system).