

第一原理計算による SiC 熱酸化中における炭素原子消失メカニズム

First-principle calculation for a mechanism of carbon annihilation during the SiC oxidation

○松下 雄一郎、押山 淳（東大院工）

°Yu-ichiro Matsushita, Atsushi Oshiyama (The University of Tokyo)

E-mail: matsushita@comas.t.u-tokyo.ac.jp

炭化ケイ素 (SiC) は、その優れた物性（大きなバンドギャップ、強い化学結合）から次世代パワーデバイス半導体として大きな注目を集めている。また、熱酸化を利用して SiO₂ 絶縁膜を作成することが出来、MOSFET 構造を作成することが出来るという優れた点もある。しかし、現在の SiC-MOSFET の易動度はバルク時の 10% 程度でしかなく、界面に高密度欠陥準位が存在すると考えられている。それら欠陥構造を同定しようという試み[1]がなされてはいるが、未だ特定には至っていない。また、酸化プロセス自体が学術的に興味深く、例えば、SiO₂ 膜を合成するためには炭素原子は酸化途中で消滅する必要があるが、その消滅メカニズムは未解明のままである。また、C 面[または (000-1) 面]の酸化速度は Si 面[(0001) 面]のその約 10 倍であることが知られており、原子レベルでの SiC の酸化プロセスを明確にすることは極めて重要な課題となっている。

本研究では、4H-SiC の Si-, C-両面の初期酸化を明らかにすべく、密度汎関数理論に基づく第一原理シミュレーションを実行した。電子構造計算の際の交換相関エネルギーには PBE (Perdew-Burke-Ernzerhof)[2] を採用し、欠陥準位の定量的な見積もりには HSE (Hyde-Scuseria-Ernzerhof) [3]を用いた。本研究では、各 Si および C サイトが酸化される際の、最も実現可能と思われる反応経路とそれに対応する活性化障壁を見出した。

その結果、以下のような主要な結果を得ることが出来た：

Si 面の場合には、 (1)C 原子が SiC/SiO₂ 界面において、小さな(2,3 原子数程度の)炭素クラスターを形成することを明らかにした。さらに、我々は、炭素クラスターが一重結合と二重結合から構成されていることを見出した。(2)MD シミュレーションにより、CO 分子が炭素クラスターから分離、解離される様子が観察された。

C 面の場合には、 (3)炭素原子は、CO 分子として SiC 基板から直接解離した。CO 解離によるエネルギー利得は 3.2 eV と計算された。(4) SiC/SiO₂ 界面において C-サイトにダングリングボンドが高密度に存在する様子がシミュレートされた。また、そのダングリングボンドは、エネルギーギャップ中にエネルギー準位を形成することが分かった。(5)CO 解離後、Y-lid と呼ばれる 3 配位の酸素原子が界面に観察された。Y-lid のエネルギーレベルは伝導帯下端の直下に位置していることが計算された。

[1] For a recent review, T. Kimoto and J. A. Cooper, "Fundamentals of Silicon Carbide Technology" (IEEE Press, Wiley, 2014).

[2] J.P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett., **77**, 3865(1996).

[3] J. Heyd, G. E. Scuseria, and M. Ernzerhof, J. Chem. Phys. **118**, 8207 (2003); **124**, 219906(E) (2006).