

SiC 酸化による C=C 結合欠陥形成の理論的考察

Theoretical investigation of C=C bonding defect formation by SiC oxidation

名大院工¹, 名大未来研², [○]長川 健太¹, 洗平 昌晃², 白石 賢二^{2,1}

Graduate School of Engineering, Nagoya Univ.¹, IMASS, Nagoya Univ.²

[○]Kenta Chokawa¹, Masaaki Araidai^{2,1}, Kenji Shiraishi^{2,1}

E-mail: chokawa@fluid.cse.nagoya-u.ac.jp

1. はじめに

SiC はその優れた物性値により、高性能なパワーデバイス材料と期待されている。しかし熱酸化により形成される SiC/SiO₂ 界面に多くの欠陥が存在しており性能向上を阻害している。欠陥に関しては多くの研究がなされているが未だに解明できていない事も多い。そのため本研究では密度汎関数法に基づく第一原理計算により、SiC の熱酸化を仮定した数値計算を行い界面に形成される欠陥構造について考察した。これまでの研究により界面の酸化により C-C 結合欠陥が形成されることを確認しており[1]、本研究では別の欠陥について考察する。計算には数値計算パッケージ VASP[2]を使用しており、カットオフエネルギーは 500eV、サンプル k 点数は 6x6x2 点使用している。

2. 計算結果と考察

計算モデルとして 32 原子からなる 4H-SiC(0001) 2x2 表面のスラブモデルを作成した。真空層は 15Å とり表面のダングリングボンドは H 原子により終端してある。このモデルに O 原子を吸着させることで酸化を仮定し、得られる構造の解析を行った。初期構造として O 原子を 2 つ挿入したものを用意した。酸素原子は SiC 表面の 2 つの Si 原子と反応し、Si-O-Si 構造を形成することを予測し、2 つの Si 原子の中間地点に配置した。この構造最適化の結果を Fig.1(a)に示す。予測した通りに 2 つの Si-O-Si の構造が形成されるとともに、炭素原子同士で二重結合を形成する C=C

結合欠陥を形成した。これは Si-O-Si 構造の形成により Si-C の結合が切断され、不安定となった炭素原子が安定化するために 2 つの C 原子が結合を形成したためである。そのためこの構造中にはダングリングボンドは存在していない。形成された C=C 結合の結合距離は 1.38Å であり、エチレン中の C=C 結合距離である 1.34Å に近い値となっている。また欠陥構造形成後の状態密度を Fig.1(b)に示す。反応の前後で価電子帯上端及び、伝導体下端付近に C=C 結合欠陥由来の欠陥準位が形成されている事が確認された。講演では電子状態に関する詳細な議論を行う。

[1] K.chokawa et al, Materials Science Forum. Vols. 740-742 (2013) pp 469-472.

[2] G. Kresse and J. Furthmüller, Phys. Rev. B **54**, 11169, (1996).

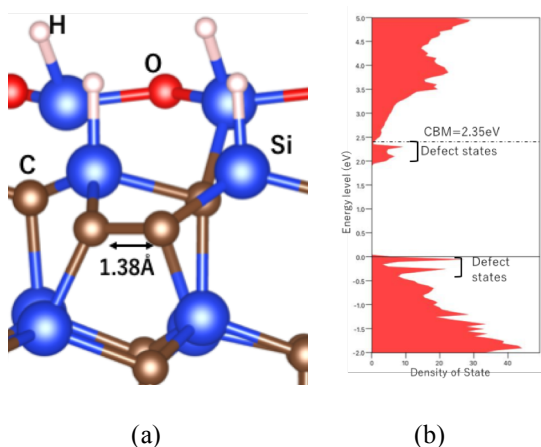


Fig.1 (a) C=C bonding defect structure induced by oxidation and (b) its density of states around the band gap. Valence band top level is set to the zero.