4H-SiC/SiO_2 界面 O_2 酸化の第一原理シミュレーション ～$SiC(0001)_{Si}$ 面と$(000\text{-}1)_C$ 面の違い～

First-Principles Molecular Dynamics Simulations of O_2 Oxidation in 4H-SiC/SiO_2 ~Differences between $SiC(0001)_{Si}$ and $(000\text{-}1)_C$ faces~

°山崎隆浩 [1,2]，田島暢夫 [1,2]，金子智昭 [1,2]，奈良純 [1,2]，清水達雄 [3]，加藤弘一 [4]，大野隆央 [1,2]
NIMS[1], MARCEED[2], Toshiba R&D Center[3], IIS, Univ. of Tokyo[4]
°T. Yamasaki[1,2], N. Tajima[1,2], T. Kaneko[1,2], J. Nara[1,2], T. Schimizu[3], K. Kato[4], and T. Ohno[1,2]
E-mail: YAMASAKI.Takahiro @nims.go.jp

【背景】SiC 基板と絶縁膜の界面特性向上に寄与することを目標に、これまでわれわれは第一原理分子動力学法（FPMD）や古典 MD を用いて SiC の O_2 酸化機構を観察してきた [1-3]。前回は $SiC(000\text{-}1)_C$ 面にアモルファス状の SiO_2 膜を重ねた構造を作って界面に O_2 を供給し有限温度の FPMD を行った結果に基づき CO や CO_2 の脱離が起こる機構を報告した[3]。

【計算内容】今回、$SiC(0001)_{Si}$ 面にアモルファス状 SiO_2 膜を重ねた構造をつくり PHASE/0[4] を使った 2000K の FPMD シミュレーションを行った。界面近傍に 1～3ps にひとつの割合で合計 18 個までの O_2 分子を導入した。O_2 導入位置を変えた合計 7 系統のシミュレーションを行った。$SiC(000\text{-}1)_C$ 面/SiO_2 構造（界面直下に CC 結合がある）に対しても、前回から計算を進めて同じ O_2 分子導入数、同じ系統数のシミュレーションを行った。

【解析】いずれの界面構造でも 10 個以上の O_2 導入により CO あるいは CO_2 の脱離がおきたが、O_2 を 10～18 個導入した（7 系統の総積算時間）130～140 ps に 12～14 個の同程度の炭素化学種の脱離があった(Table I)。C クラスタは C 面の界面には比較的大きなものが凝集するのに対し、Si 面の界面では分解して一部が SiO_2 側に拡散する傾向があった（Fig.1）。界面には単位格子あたり 1 2 個の Si（水色の球）があったがこれらは酸化に伴い SiO_2 層に拡散した。この他、酸化に伴う構造変化、界面 Si の脱離と移動などにも着目し酸化特性の違いを論ずる。なお本研究は文科省 HPCI 戦略プログラム（分野４）およびポスト「京」重点課題６の補助を受け実施し、計算の一部に京計算機を用いた。

Table.I Desorptions of C-related molecules from SiC/SiO_2 interfaces through O_2 oxidations

	#02 Series	10	11	12	13	14	15	16	17	18
Siface	1					CO2				
	2								C3O2	
	3									
	4									
	5		CO2				CO, CO			CO, CO2
	6					CO2				CO
	7			CO					CO2	CO2
Cface	1									
	2								CO	CO2, CO2
	3									CO, CO2
	4			CO				CO, CO2		
	5	CO								
	6		CO							
	7							CO, CO2		

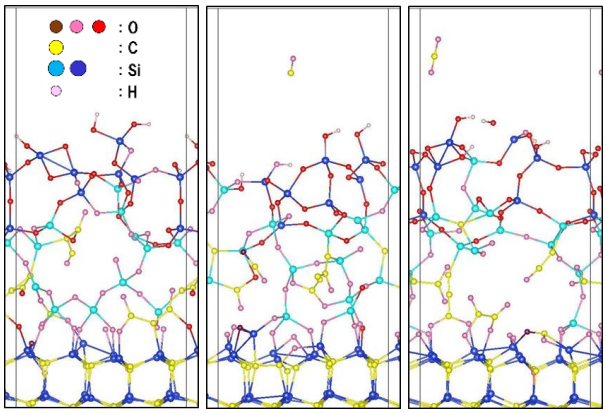

Fig.1 Sideviews at last MDs in 18-O_2-periods of 3 series among 7 for the $SiC(0001)_{Si}/SiO_2$

[1]T. Yamasaki, N. Tajima, T. Kaneko, J. Nara, T. Schimizu, K. Kato, and T. Ohno, 応用物理学会2015年秋 15p-PA4-4.
[2]T. Yamasaki, N. Tajima, T. Kaneko, et al., Materials Science Forum 858 (2016) pp. 492-432.
[3]山崎、田島、金子、清水、加藤、大野、応用物理学会 2016 年春 21p-P10-14.
[4]T. Ohno, T, Yamamoto, T. Kokubo, Y. Sakaguchi, T. Uda, T. Yamasaki, D. Fukuta and J. Koga, *SC'07 Proceedings of the 2007 ACM/IEEE conference on Supercomputing* Article No. 57. ; https://azuma.nims.go.jp/

© 2016年 応用物理学会