

4H-SiC/SiO₂ 界面酸化の第一原理シミュレーション ~O₂ 酸化による炭素凝集と CO 脱離~

First-Principles Molecular Dynamics Simulations of 4H-SiC Oxidation

~C-condensation and CO desorption through O₂ oxidation~

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

1. 物材機構, 2. MARCEED, 3. 東芝研究開発センター, 4. 東大生産研

°T. Yamasaki^{1,2}, N. Tajima^{1,2}, T. Kaneko^{1,2}, T. Schimizu³, K. Kato⁴, and T. Ohno^{1,2,4}

1.NIMS, 2.MARCEED, 3.Toshiba R&D Center, 4.IIS, Univ. of Tokyo

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

SiC 基板と絶縁膜の界面特性を向上させることは、高耐圧で大電流動作可能なパワーデバイスを実用化する上で最も重要な課題である。このためには酸化反応機構を理解することが必要で、これまでわれわれは第一原理分子動力学(MD)および古典的 MD 手法を用いて考察してきた [1,2]。

今回、CO 脱離を伴う O₂ 分子による酸化反応機構を理解するため、これまでに得た知見をもとに SiC(000-1)C 面にアモルファス状の SiO₂ 膜を積み重ねた構造をつくり (Fig.1: 界面には単位格子あたり 12 個の Si(水色の球)があり、その直下には CC 結合が高密度で存在している)、プログラム PHASE/0[3]を使った第一原理 MD シミュレーションを行った。温度は 2000K に設定し、界面近傍に 1~3ps にひとつの割合で合計 15 個以上の O₂ 分子を導入した。これまで報告したように[1]、酸化が進むに従い界面にあった Si の一部は SiO₂ 膜側に拡散し、同時に SiC 基板側にあった CC 結合を構成する C 原子の一部も解離し拡散し、C クラスタを構成した。これにより界面の一部領域に新たな C 面が露出した状態になる様子も観測された。10 個以上の O₂ を導入したところで CO の脱離が始まった。Si-C(=O)O-Si のようなカルボン酸エステル構造から CO が脱離する(Fig.2)ものが多かった。一旦脱離してもすぐに別の原子に結合して消失するものもあった。これらの知見に基づいて C 面の酸化機構について考察する。なお本研究は文科省 HPCI 戦略プログラム (分野 4) の補助を受け実施され、計算には京計算機を用いた。

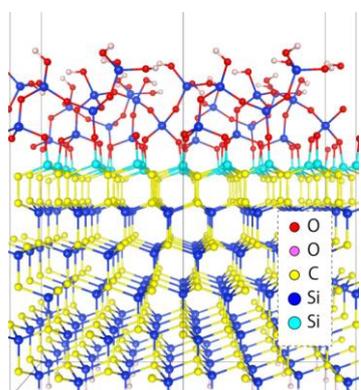


Fig.1 Initial SiC(000-1)C/SiO₂ interfacial structure

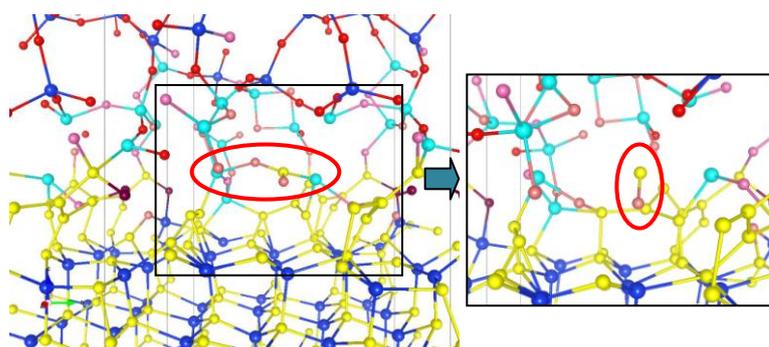


Fig.2 A CO desorption process observed in a MD simulation. Last introduced O atoms are denoted with dark red balls.

[1]山崎、田島、金子、西川、清水、加藤、大野、応用物理学会 2015 年春 13a-B4-3.

[2] T. Yamasaki, N. Tajima, T. Kaneko, J. Nara, T. Schimizu, K. Kato, and T. Ohn, 応用物理学会 2015 年秋 15p-PA4-4.

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