

4H-SiC/SiO₂ 界面における NO 酸窒化による炭素窒素置換反応

First-Principles Molecular Dynamics Simulations of NO Oxynitridation in 4H-SiC/SiO₂

~Substitution Reaction between N and C at the Interface~

物材機構¹, MARCEED², 東芝研究開発センター³, 東大生産研⁴

○山崎隆浩^{1,2}, 田島暢夫^{1,2}, 奈良純^{1,2}, 清水達雄³, 加藤弘一⁴, 大野隆央^{1,2}

NIMS¹, MARCEED², Toshiba R&D Center³, IIS, Univ. of Tokyo⁴

○T. Yamasaki^{1,2}, N. Tajima^{1,2}, T. Kaneko^{1,2}, J. Nara^{1,2}, T. Schimizu³, K. Kato⁴, 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 (First-Principles Molecular-Dynamics: FPMD) や古典 MD を用いて SiC の O₂ 酸化シミュレーションを行い、酸化の面方位依存性、CO や CO₂ 脱離が起きる機構、界面近傍の欠陥がつくる準位について報告してきた[1,2]。今回、NO 分子による後アニール処理の効果を検証するため、PHASE/0[3]を用い FPMD シミュレーションを行った。【計算方法】SiC(0001)_{Si} 面と酸化膜の理想界面構造を用意し、界面近傍の空隙に NO 分子を導入し、温度を 2000K に保った MD を行った。Si と H に対してはノルム保存型のそれ以外の原子に対してはウルトラソフト型の擬ポテンシャルを用いた。【計算結果】ひとつめの NO 分子をどの原子からでも 1.85 Å 以上離れた位置に置いたときには、解離反応が起きなかったが、

それより近い位置に置いたとき (Fig.1a) 解離反応し、N は C に置換し、O は押し出された C に結合した (Fig.1b)。さらに NO 分子を 2 回導入したが反応せず真空中に脱離した。その間 (1 ps)、押し出された C 原子はさらに SiO₂ 側に移動した (Fig.2a)。同時に界面 Si に未結合手が発生した。この近傍に NO 分子を導入したところ、解離反応しその後 CO が真空中に脱離した (Fig.2b)。一連の経過から、最初に界面で解離した NO の N が界面直下にある C に置換し、C は CO となって脱離したとみることができる。Fig.2b で界面の未結合手はほぼなくなり、ここに NO 分子を複数回導入したが反応しなかった。【謝辞】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 (hp160226, hp170226)。

[1]山崎、田島、金子、奈良、清水、加藤、大野、第

6 4 回応用物理学会春季学術講演会(2017) 17a-301-4.

[2]高本、山崎、大野、金田、泉、酒井、第 6 4 回応用物理学会春季学術講演会(2017) 17a-301-5.

[3] T. Ohno, T. Yamamoto, T. Kokubo, A. Azami, Y. Sakaguchi, T. Uda, T. Yamasaki, D. Fukuta and J. Koga, *Proceedings of the 2007 ACM/IEEE conference on Supercomputing (SC'07)*, 2007, No57. ; <https://azuma.nims.go.jp/>

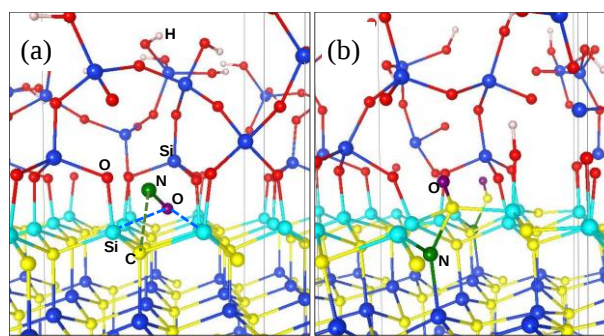


Fig.1 (a)An initial and (b) the last (1.18 ps) structure of NO introduced SiC(0001)_{Si}/SiO₂

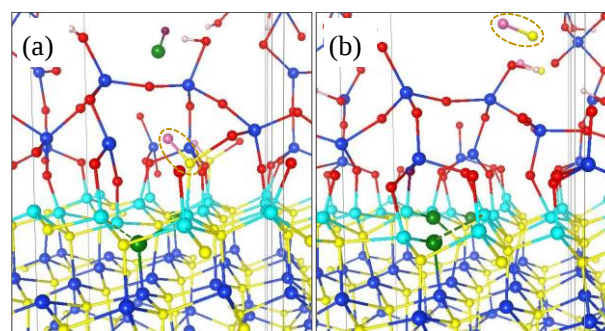


Fig.2 (a)Thirdly introduced NO escaped to vacuum region and (b)fourthly introduced NO dissociated at the interface and CO at the interface escaped to vacuum