

4H-SiC/SiO<sub>2</sub> 界面におけるウェット酸化反応過程に関する理論的検討Theoretical study for wet oxidation reaction mechanisms at 4H-SiC/SiO<sub>2</sub> interfaces三重大院工<sup>1</sup>, 島根大院理工<sup>2</sup>, 慶大理工<sup>3</sup>, 名大院工<sup>4</sup>○堀真輔<sup>1</sup>, 秋山亨<sup>1</sup>, 中村浩次<sup>1</sup>, 伊藤智徳<sup>1</sup>, 影島博之<sup>2</sup>, 植松真司<sup>3</sup>, 白石賢二<sup>4</sup>Mie University<sup>1</sup>, Shimane University<sup>2</sup>, Keio University<sup>3</sup>, Nagoya University<sup>4</sup>○S. Hori<sup>1</sup>, T. Akiyama<sup>1</sup>, K. Nakamura<sup>1</sup>, T. Ito<sup>1</sup>, H. Kageshima<sup>2</sup>, M. Uematsu<sup>3</sup>, K. Shiraiishi<sup>4</sup>

E-mail: 416M614@m.mie-u.ac.jp

[はじめに] ワイドギャップ半導体である SiC は、熱酸化により SiO<sub>2</sub> 絶縁膜が得られることから MOSFET 等の電子デバイスに適用可能な材料として注目されている。しかしながら、SiC と SiO<sub>2</sub> の界面には大量の欠陥が形成されることが知られており、SiC を用いた電子デバイスの実用化は未だ困難である。特に、ウェット酸化では MOSFET のチャネル移動度の改善が見られる一方、酸化膜の信頼性が低下することから、ウェット酸化機構に関する研究が数多く行われている[1,2]。我々はこれまでにドライ酸化での 4H-SiC/SiO<sub>2</sub> 界面における反応過程を理論的に検討し、酸素(O<sub>2</sub> 分子として)の反応に伴って形成する酸化膜の構造および C 原子の脱離の挙動が面方位に依存することを明らかにした[3,4]。本研究では、ウェット酸化機構の解明を目的として酸化種として H<sub>2</sub>O および OH<sup>-1</sup>[5]を考慮した場合における 4H-SiC/SiO<sub>2</sub> 界面での反応過程を検討する。

[結果および考察] Fig. 1(a)~(c)は第一原理計算を用いて求めた Si および C 面 4H-SiC/SiO<sub>2</sub> 界面における安定構造を示している。Fig.1 から、ウェット酸化においては極性に依存して異なる界面構造を形成することを示唆される。Si 面においては、酸化種として H<sub>2</sub>O および OH<sup>-1</sup>を考慮した場合での反応エネルギーは吸熱性であり、H<sub>2</sub>O および OH<sup>-1</sup>は Si 面上の SiC 基板とほとんど反応しない。一方、2つの OH<sup>-1</sup>が SiC と反応すると Si-O-Si および H-C-OH ボンドを形成して安定構造[Fig. 1(a)]となる。これは、より安定な Si-O ボンドを形成するように Si-C ボンドが組み替わることに拠るものと考えられる。従って、Si 面においては界面近傍において複数の OH<sup>-1</sup> が関与した場合のみ反応が起こるがその頻度が少ないことが予想され、その結果として低い酸化速度が示唆される。C 面においては、いずれの場合においても発熱反応であり、C 面上の SiC 基板と反応して C-C および C=O ボンドを形成して安定構造[Fig. 1(b)および(c)]となる。この場合、H<sub>2</sub>O および OH<sup>-1</sup>によって界面近傍の C-O および Si-C ボンドから安定な C-C および C=O ボンドが形成している。C 面において、一連の界面反応過程における H<sub>2</sub>O および OH<sup>-1</sup>のエネルギー障壁値は 3.9 および 1.9 eV であり、OH<sup>-1</sup>のエネルギー障壁値は実験値(2.1 eV) [6]と同程度となっている。以上の結果は、OH<sup>-1</sup>での反応が C 面 4H-SiC/SiO<sub>2</sub> 界面における反応を律速する素過程となり得ることを示唆している。

[参考文献] [1] R. Kosugi *et al.*: IEEE EDL **23** (2002) 136. [2] H. Okada *et al.*: IEICE Technical Report SDM **90** 2012. [3] T.

Akiyama *et al.*: Surf. Sci. **641** (2015) 135. [4] A. Ito *et al.*: JJAP **54** (2015) 101301. [5] T. Bakos *et al.*: PRL **88**, 055508 (2002). [6] S. Kumar *et al.*: in *Silicon Carbide – Materials, Processing and Application in Electronic Devices*, edited by M. Mukherjee, pp. 208-230 (In Tech, Rijeka, 2011).

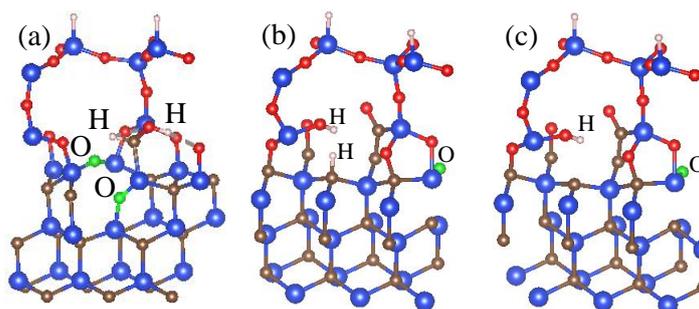


Fig. 1: Geometries of (a) Si-O-Si and H-C-OH bonds hosting 2OH<sup>-1</sup> near the Si-face 4H-SiC/SiO<sub>2</sub> and (b) C-C, C=O, Si-O, Si-OH and C-H bonds hosting H<sub>2</sub>O, (c) C-C, C=O, Si-O and Si-OH bonds hosting OH<sup>-1</sup> near the C-face 4H-SiC/SiO<sub>2</sub>. Blue, brown, white, red and green circles represent Si, C, H, O and O atom of oxidant atoms. The O and H atoms of each oxidants are labeled.