

第一原理計算による a-, m-面上の 4H-SiC/SiO₂ 界面モデル構造の構築

Construction of 4H-SiC/SiO₂ interface models on a- and m-faces

by first-principles calculations

NIMS¹, 東芝 R&D², 東大生研³ 金子智昭¹, 田島暢夫¹, 山崎隆浩¹,

奈良純¹, 清水達雄², 加藤弘一³, 大野隆央¹

NIMS¹, Toshiba R&D.², Univ. Tokyo, Institute for Industrial Science³, Tomoaki Kaneko¹, Nobuo

Tajima¹, Takahiro Yamasaki¹, Jun Nara¹, Tatsuo Shimizu², Koichi Kato³, Takahisa Ohno¹

E-mail: NARA.Jun@nims.go.jp

ワイドギャップ半導体の SiC は高い移動度などの優れた特性を示すことより、パワーデバイスへの応用が期待されている。これまで、図(a)に示す Si-面と呼ばれる 4H-SiC の (0001) 表面を用いた界面を中心に研究が行われてきたが、期待されるほどの移動度が得られないなどの問題が知られている。そこで、近年、図(b)に示した他の面方位である a-面 (11-20) や m-面 (1-100) の利用が検討され、活発に実験が行われている。これらの面を用いたデバイスでは移動度が Si-面を用いたデバイスより高くなるなど、有望視されている。しかし、これまで a-面や m-面についての理論計算による解析はほとんど行われていない。そこで、第一原理計算により a-面、m-面での 4H-SiC/SiO₂ 界面モデル構造の作成を試みた。

a-面の (2x1) 構造、m-面の (3x1) 構造の面積がほぼ 1 nm² であることに注目して、ユニットセルあたりのボンド密度が一定になるようにアモルファス状の SiO₂ を堆積させた。作成した界面モデル構造を図(c), (d) に示す。1000°Cでの第一原理分子動力学シミュレーションでも構造が壊れることはなく、SiO₂ の結合長と角度、原子密度はアモルファス状の SiO₂ の典型的な値がえられた。作成した界面モデル構造について、HSE06 での電子状態計算も行った。電子状態については欠陥のない Si-面の計算と際立った違いがないため、欠陥の分布や密度が a-, m-面での高い移動度の原因と推察される。今後、このモデルを用いて欠陥構造・電子状態の解析、酸化の分子動力学シミュレーションの研究などに発展させる予定である。

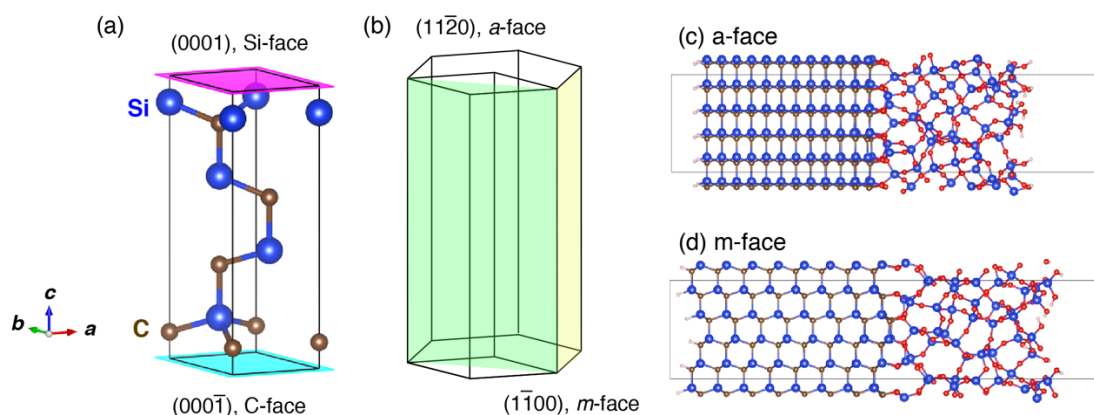


図 : (a) 4H-SiC. 青, 茶はそれぞれ Si, C 原子. (b) a-面 (緑) と m-面 (黄色). (c) 作成した a-面の界面モデル構造. 赤は O 原子. (d) 作成した m-面の界面モデル構造.