## 4H-SiC/SiO<sub>2</sub>界面 O<sub>2</sub>酸化の第一原理シミュレーション ~炭素クラスターの形成と拡散~

First-Principles Molecular Dynamics Simulations of O2 Oxidation in 4H-SiC/SiO2

~ Formation and Diffusion of C Clusters ~

物材機構<sup>1</sup>, 東芝研究開発センター<sup>2</sup>, 東大生産研<sup>3</sup>、富士通研<sup>4</sup>

°山崎隆浩<sup>1</sup>,田島暢夫<sup>1</sup>,金子智昭<sup>1</sup>,奈良純<sup>1</sup>,清水達雄<sup>2</sup>,加藤弘一<sup>3</sup>,金田千穂子<sup>4</sup>,大野隆央<sup>1</sup> NIMS<sup>1</sup>, Toshiba R&D Center<sup>2</sup>, IIS, Univ. of Tokyo<sup>3</sup>, FUJITSU Labs. Ltd<sup>4</sup>.

°T. Yamasaki<sup>1</sup>, N. Tajima<sup>1</sup>, T. Kaneko<sup>1</sup>, J. Nara<sup>1</sup>, T. Schimizu<sup>2</sup>, K. Kato<sup>3</sup>, C. Kaneta<sup>4</sup>, and T. Ohno<sup>1</sup>

## 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O2酸化、NO酸窒化機構を観察してきた [1-6]。 O2酸化に関しては、これによって界面に炭素クラスターが生成し、これが欠陥準位のもとになる ことなどを報告してきた [3-5]。

【計算内容】今回、SiC(0001)Si 面/SiO<sub>2</sub> 界面における O<sub>2</sub> 酸化の FPMD シミュレーション (PHASE/0[7]を使い温度は 2000K) に関してこれまでより酸素量を増やした計算を行い、これま での計算も合わせて Si 面および C 面における炭素クラスター生成過程を解析した。O<sub>2</sub>を1分子 導入し1~2 ps、MD を行い反応させる操作を連続的に 22分子導入するまで行った (C 面に関して は 14 系統、Si 面に関しては 8 系統)。

【解析結果】O<sub>2</sub>分子を 11~22 個まで導入したあとに発生した C クラスターの界面垂直方向の分 布と大きさを Fig.1 に示す。形成された C クラスターの一部が酸化の進行に伴い表面方向に拡散

していく。最大のクラスターはいずれの 面でも C19 であった(円の大きさがク ラスターの大きさを表す)。クラスター に含まれる C は大部分平面的あるいは 鎖状の結合をしている。C 面では基板の 深いところに C<sub>2</sub>~C<sub>4</sub>のクラスターが生 成されることがあった。C<sub>3</sub>以上の炭素 クラスターの平均サイズはC面では5.9, Si 面では 5.1 であった。また、界面準位 は C クラスターに由来するものが多い が、界面 C の個数とではなく C クラス ターの状態と関係が深いことが分かっ た。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(hp150266, hp160226, hp170226)、計算の一部に京計 算機および NIMS スパコンを用いた。



Fig.1 Distributions of C-clusters in normal direction to the interfaces of  $SiC(000-1)/SiO_2$  (upper left) and  $SiC(0001)/SiO_2$  (lower left) for reacted structures after 11 to 22 O<sub>2</sub> introductions. A sideview of one of the reacted structures in 16 O<sub>2</sub> introduction is displayed as an example in each of the distribution graphs.

[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]同 2016 年秋 14p-P9-11. [5]同 2017 年春 17a-301-4. [6]同 2017 年秋 5a-A203-1.

[7]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. ; <u>https://azuma.nims.go.jp/</u>