

4H-SiC(1-100)表面と NO のシミュレーションによる反応解析

Surface reaction of 4H-SiC (1-100) with NO molecules

analyzed by DFTB simulations

富士電機 ○小笠原 美紀, 広瀬 隆之

Fuji Electric ○Miki Ogasawara and Takayuki Hirose

E-mail: ogasawara-miki@fujielectric.com

【はじめに】 SiC-MOSFET において、移動度向上にはゲート酸化膜の界面制御が重要である。界面制御には酸化膜形成工程における界面の原子構造を明らかにし、界面準位の形成メカニズムを解明する必要がある。そこで本研究では、シミュレーションによって 4H-SiC(1-100)と NO との窒素化反応による原子構造の変化を解析した。

【計算・結果】 密度汎関数法に基づくタイトバインディング計算プログラムである、ダッソー・システムズ・バイオビア社製の MS-DFTB⁺を用いて動力学計算を行った。(1-100)の最表面の SiC の配列は光電子回折法による分析結果から図 1 の様に決定した。表面のダングリングボンドは水素で終端する構造を仮定した。168 原子の H 終端 SiC モデルに対して 1573 K において 5 ps 緩和計算を実施した後に NO 分子を 1 ps 毎に 1 分子ずつ計 30 分子 SiC 表面近傍に追加し、SiC 表面と NO との反応過程を解析した。

図 2 に 30 ps 計算した後の構造を示す。表面に Si-O 結合が複数形成し酸化膜が形成され始めている様子がわかる。また、窒素は界面近傍で Si₃N 結合による終端構造を形成しており、その他 CN 結合の形成も確認された。実験では NO 処理したサンプルの光電子分光分析から、界面近傍で多くの Si₃N とその他の窒素化合物が形成されることが分かっており、本結果は定性的にこの結果を再現するものである。

【謝辞】 本研究は、名古屋大学未来材料・システム研究所の白石賢二教授、洗平昌晃助教、名古屋大学院工学研究科計算理工学専攻の長川健太氏から助言を頂き実施致しました。深く感謝致します。

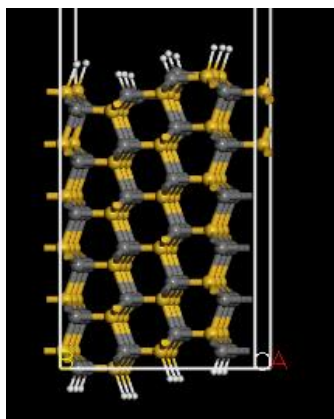


Fig.1 A structure of 4H-SiC (1-100) model. Gray, yellow, and white balls are carbon, silicon, and hydrogen atoms, respectively.

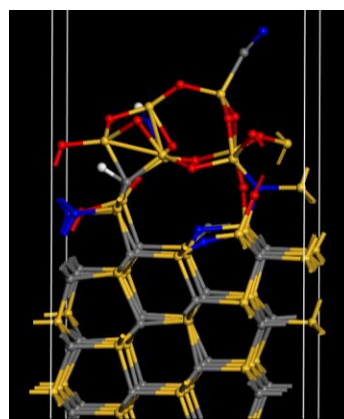


Fig.2 A calculated structure at 1573K after 30 ps. Gray, yellow, white, red, and blue balls are carbon, silicon, hydrogen, oxygen, and nitrogen atoms, respectively.