

4H-SiC (0001) および (000-1) 表面での NO 酸窒化反応シミュレーション

The oxinitridation simulation of 4H-SiC with NO molecules

on (0001) Si-face and (000-1) C-face

富士電機, °広瀬 隆之, 小笠原 美紀, 森 大輔, 寺尾 豊

Fuji Electric °Takayuki Hirose, Miki Ogasawara, Daisuke Mori, Yutaka Terao

E-mail: hirose-takayuki@fujielectric.com

【はじめに】 SiC-MOSFET では、高移動度・高信頼性を得るために界面準位密度の低減が重要であり、NO 酸化等によって SiC/SiO₂ 界面に窒素を導入すると界面準位密度が低減することが知られている。この時、窒素の界面での化学状態と構造を明らかにするために、例えば X 線光電子分光(XPS)による解析が行われている[1]。それによると、80%以上は Si₃N 構造となっているが、それ以外の構造は不明であり、それらが界面準位の起源となっている可能性がある。この起源を明らかにするために、本研究では DFTB (Density Functional Tight Binding)*を用いた NO 分子と SiC 表面の酸窒化反応シミュレーションを行い、SiC 表面構造の変化を解析した。SiC 面方位により Si₃N の取り得る構造に違いがあると考えられていることから[1]、本シミュレーションでは(0001)Si 面と(000-1)C 面での構造変化を比較した。

【計算および結果】シミュレーションモデルとして表面を水素終端した(0001)Si 面および(000-1)C 面を用いた。これらの表面に対し、温度 1573 K において NO 分子を 1 ps 毎に 1 分子ずつ表面近傍に追加して動力学計算を実施し、SiC の表面酸窒化構造を得た。NO 分子を 10 個導入して得られた結果を Fig.1 (a)と(b)に示す。いずれも炭素の位置に窒素が置換するように Si₃N 構造が形成されていた。これらの構造は、XPS 分析で予測された構造[1]に類似していることが分かった。発表では、さらに NO 分子を導入して得られる結果について報告予定である。

【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。

[1] 森 大輔 他, 電子情報通信学会論文誌 C, J100-C, No.9, pp.377, (2017).

*ダッソー・システムズ・バイオビア社製の MS-DFTB⁺を用いた。

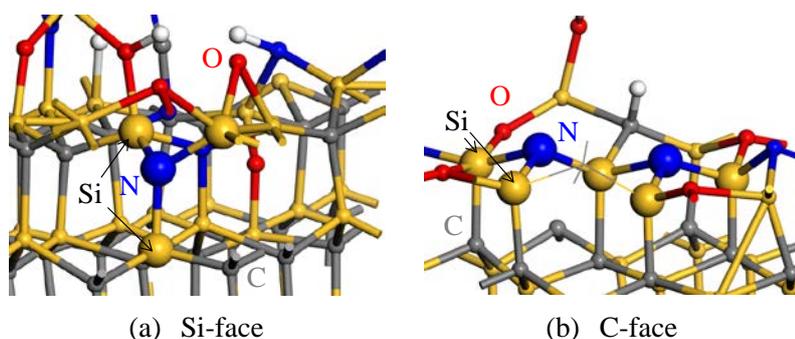


Fig.1 Calculated structures at 1573K after 10 ps. Gray, yellow, white, red and blue balls are carbon, silicon, hydrogen, oxygen, and nitrogen atoms, respectively.