

4H-SiC(1-100)表面での O₂ 酸化反応シミュレーションThe oxidation simulation of 4H-SiC with O₂ molecules on (1-100) face

富士電機, °広瀬 隆之, 小笠原 美紀

Fuji Electric °Takayuki Hirose, Miki Ogasawara

E-mail: hirose-takayuki@fujielectric.com

【はじめに】 SiC を用いた MOSFET は次世代パワーデバイスとして期待されているが、SiC/SiO₂ 界面近傍のトラップ電荷密度が高く、チャネル移動度低下といった性能低下の問題を抱えている。界面近傍のトラップ電荷密度が高い原因の一つに、SiC/SiO₂ 界面近傍の余剰炭素が指摘されており [1]、[2]、電子エネルギー損失分光法で SiO₂/SiC 界面近傍で余剰炭素(π^* ピーク)の検出が報告されている [3]、[4]。この π^* ピークの起源は C-C 結合と推定されるが、面方位によって SiC 側か SiO₂ 側か存在する場所が異なることが観測されている [4]。この面方位によって異なるメカニズムの解明を目的とし、現在 DFTB (Density Functional Tight Binding)*を用いた SiC 表面の酸化反応シミュレーションによって C-C 結合生成の位置や反応経路を解析しており、これまで Si 面と C 面での NO による酸窒化反応の解析を行った [5]。今回、トレンチ MOSFET のトレンチ壁面である (1-100) 面について酸素による酸化反応で生じる C-C 結合の生成位置を解析した。

【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 (1-100) 面を用いた。この表面に対し、温度 1573 K において O₂ 分子を 1 ps 毎に 1 分子ずつ表面近傍に追加して DFTB による動力学計算を実施した。O₂ 分子を 14 個導入 (14 ps 経過) 後と 20 個導入 (20 ps 経過) 後に得られたモデルをそれぞれ Fig.1 (a) と (b) に示す。14 個導入後、酸化層と SiC 界面に C-C 結合が生成しており、一部 SiC 側にも形成していた。20 個導入後には、SiC 側の C-C 結合が崩れて酸化層側に形成していた。

【考察】 上記の結果から、酸化の最表面では C-C 結合は界面や SiC 結晶側に形成されるが、酸化が進行すると SiC 側の C-C 結合が酸化膜側に移動し、いずれ O₂ 分子と反応して分解していくものと推測する。

発表では、さらに O₂ 分子を導入し、界面構造の変化や C-C 結合の分解過程の考察、面方位による違いを考察する予定である。

【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] K. C. Chang et al., Appl. Phys. Lett., 77, 2186 (2000)

[2] T. Kobayashi and T. Kimoto, Appl. Phys. Lett. 111, 062101 (2017)

[3] 寺尾, 広瀬, 寺西, 佐藤, 瀧川, 第 65 回応用物理学会春季学術講演会 18p-P14-15(2018)

[4] Y. Terao et al., 49th IEEE Semiconductor Interface Specialists Conference(2018)

[5] 広瀬, 小笠原, 森, 寺尾, 第 65 回応用物理学会春季学術講演会 18p-P14-14(2018)

*ダッソー・システムズ社製の MS-DFTB+ を用いた。

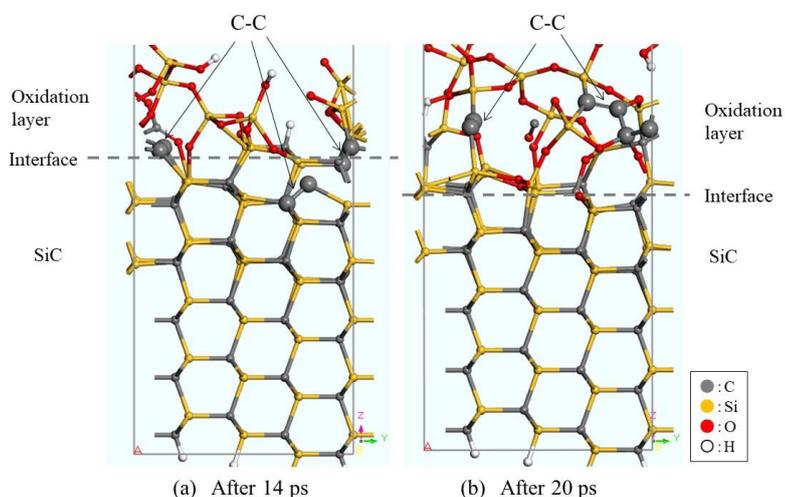


Fig.1 Calculated structures after (a) 14 ps and (b) 20 ps. Gray, yellow, red, white balls are carbon, silicon, oxygen and hydrogen, respectively.