4H-SiC(1-100)/SiO_2 界面と NO のシミュレーションによる反応解析

NO molecules reaction to 4H-SiC (1-100) /SiO_2 interface calculated 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 は高耐圧パワーデバイス用材料として期待されているが、MOSFET は基板とゲート酸化膜界面の界面準位の多さのため、材料特性から期待される移動度に遠く及ばないのが現状である。界面準位の低減に対しては NO ガスによるアニールが有効であり、C 原子の排出促進やダングリングボンドの終端が起こっていると考えられているが、詳細なメカニズムは明らかになっていない。森ら[1]は光電子回折を用いて N_2 を導入した 4H-SiC(1-100)表面では C サイトに N 原子が置換していることを明らかにした。我々はシミュレーションにおいて、NO による反応においても界面で C サイトに N 原子が置換することを報告している[2]。(1-100)表面の C サイトは 2 種類のファセット構造が混在した面であるため、ファセットによる C サイトの置換し易さは C 原子の排出メカニズムを考える上で重要な知見となる。そこで本研究では、4H-SiC(1-100)/SiO_2 界面と NO のシミュレーションから N 原子の置換位置の解析を行った。

【計算・結果】計算モデルにおいて(1-100)の最表面の SiC の配列は HAADF STEM による分析結果から決定した。シミュレーションは DFTB(Density Functional based Tight Binding)を用いて動力学計算を行った。SiC 表面にα-石英の結晶モデルを配置し、ダングリングボンドを水素で終端する構造を仮定した。217 原子のモデルに対して 1573 K において 5 ps 緩和計算を実施した構造(Fig.1(a))に NO 分子を 1 ps 毎に 1 分子ずつ計 80 分子 SiC/SiO_2 界面から 1～4.5 Å の範囲にランダムに追加し反応過程を解析した。その結果、NO によって SiC の酸窒化が進み界面が約 2 層分下層へ移動した。Si_3N は NO の追加に伴って増減しながら t=52～64 ps で最大量を示し、それ以降減少に転じた。最大量における構造を Fig.1(b)に示す。SiC の 1 層目は酸窒化膜となりその際に Si_3N が 1 箇所生成し酸化膜中へ移動した。2 層目は C ファセット側の 6 箇所の C のうち 3 箇所が N に置換した。本計算においては Si ファセット側の C との置換は確認されなかった。置換した C は酸化膜中へ移動し一部はガス化し、他は C クラスター、CN として残存した。発表では、置換の詳細な過程について報告する。

【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。

[1] D. Mori et al., Appl. Phys. Lett. **112**, 131603 (2018)
[2]小笠原、広瀬 第 65 回応用物理学会春季学術講演会 18p-P14-13

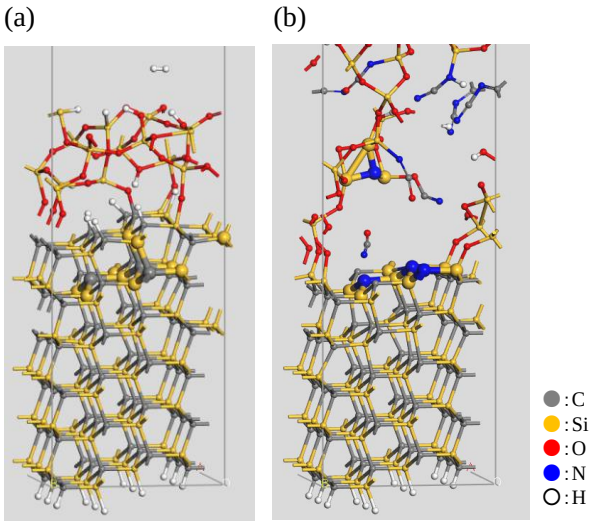

Fig.1 Interface reaction of NO molecules at 1573K
(a) t=0 (b) t=52ps