

電荷移動型分子動力学法による 4H-SiC/SiO₂ の NO アニールシミュレーションNO annealing simulation of 4H-SiC/SiO₂ by charge-transfer type molecular dynamics富士電機¹, 東大工² °大内 祐貴¹, 佐伯 英紀¹, 榊間 大輝², 泉 聡志²

1. Fuji Electric, 2. Univ. of Tokyo

°Yuki Ohuchi¹, Hidenori Saeki¹, Hiroki Sakakima², and Satoshi Izumi²

E-mail: oouchi-yuuki@fujielectric.com

【はじめに】高耐圧パワーデバイス用材料として期待されている SiC-MOSFET では、NO によるアニールが、界面準位の低減に有効であり、残留 C 欠陥の排出促進やダングリングボンドの終端が起こると考えられているが、詳細なメカニズムは議論が続いている。理論的検証として、第一原理計算などによる分子動力学計算が報告されているが[1,2]、O₂ に比べて反応性が低く、十分な検証が行えていない。近年、原子の電荷移動まで考慮した古典分子動力学法により、4H-SiC/SiO₂ 界面で数百 ps にわたる熱酸化シミュレーションが行われ、面方位に依存した反応速度や残留 C 欠陥の生成が報告された[3]。今回、新たに N を加えた Si-O-C-N からなる電荷移動型の原子間ポテンシャルを作成し、NO アニールを模擬した分子動力学計算を行った結果を報告する。

【計算手法】SiC/SiO₂ 界面に加え、SiC 表面の N 終端、アモルファス SiON、C 中 NO など、NO アニールで出現が想定される構造について第一原理計算を行い、得られた結果を教師データとして原子間ポテンシャルを作成した。4H-SiC の Si 面および C 面の上部に SiO₂ を重ねてアニールした系に対し、界面付近に繰り返し NO 分子を挿入しながら分子動力学計算を行った。

【結果と考察】Fig. 1 に 1600 K 400ps 間の計算を行った界面の構造を示す。Si 面 C 面ともに SiC の界面付近で N の取り込みが見られた。Si 面では SiC 最表面の Si 直上に O や N が比較的規則正しく整列する一方、C 面では比較的乱れた結合が形成されていることが確認された。また、Si 面では Si の直上に N が多く配置するのに対し、C 面では N が最表面の C を置換し、SiC 側の Si と 3 配位する構造が見られた。N の取り込みは C 面の方が早かった。これらは実験結果とも定性的に整合しており[4]、N による SiC/SiO₂ 界面のダングリングボンド終端までを再現する原子間ポテンシャルが得られたと考えられる。さらに、(a) C の N 置換と同時に、C と N が結合した CN 欠陥が生成しており、NO アニールで C 欠陥の結合状態も変化することが示唆された。

【参考文献】

- [1] 山崎他, 第 78 回応用物理学会秋季学術講演会 5a-A203-1 (2017).
 [2] 小笠原他, 第 66 回応用物理学会春季学術講演会 9a-PB3-9 (2019).
 [3] S. Takamoto *et al.* JAP **123**, 185303 (2018).
 [4] D. Mori *et al.* APL **111**, 201603 (2017).

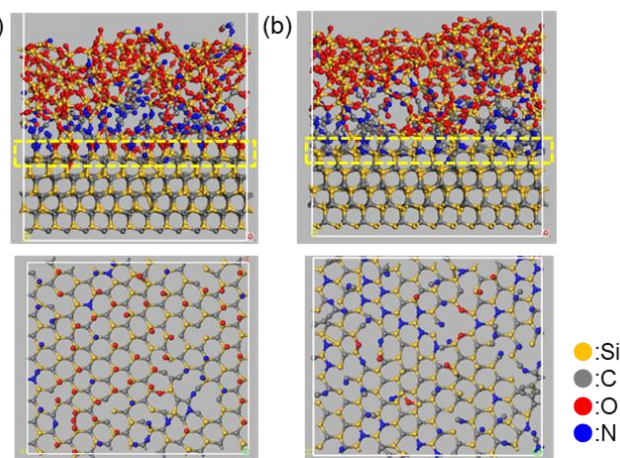


Figure 1. SiC/SiO₂ interface structure after NO annealing MD simulation in (a)Si- and (b)C-face. Upper panels are side views of the interfaces and lower ones are top views in the ranges of yellow dashed lines.