

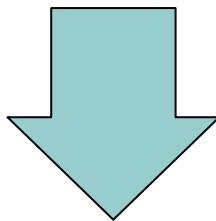
# 耐放射線性SiCデバイス用酸化膜の 第一原理分子動力学シミュレーション

原子力機構 宮下敦巳、吉川正人、叶野琢磨  
電中研 大沼敏治、酒井高行、  
岩沢美佐子、曾根田直樹

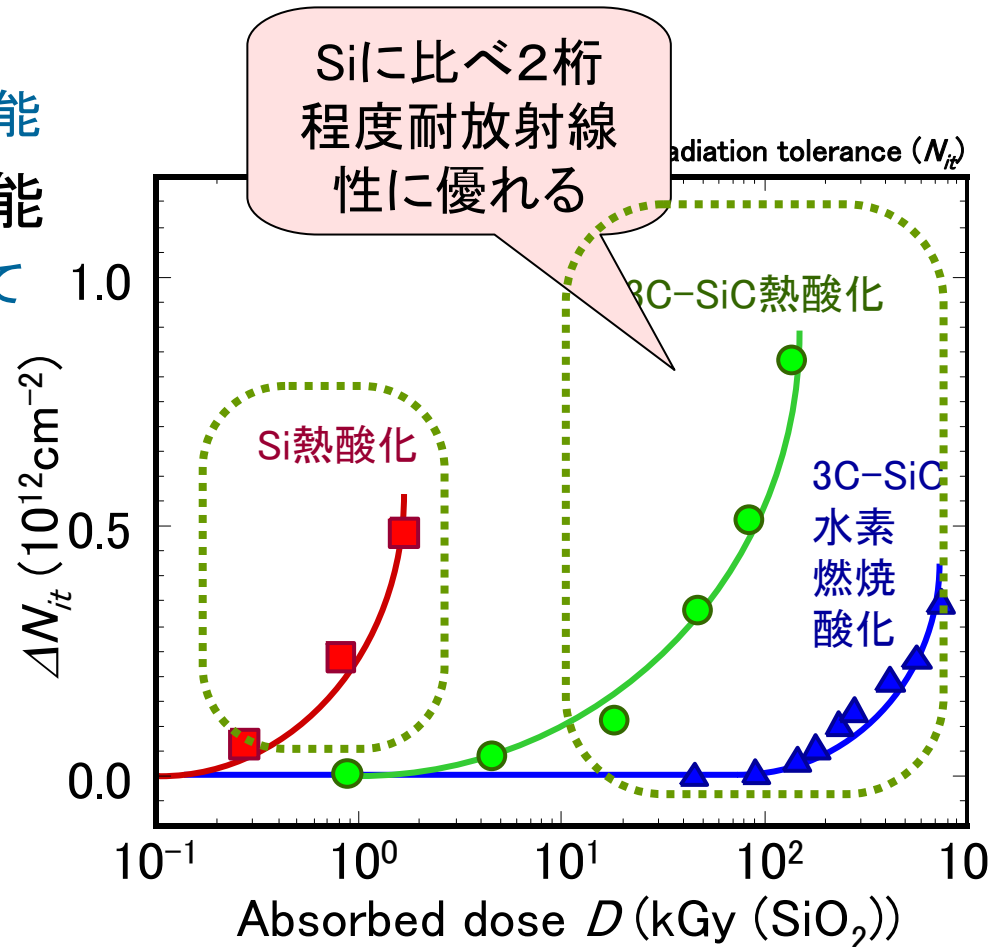
- SiCデバイスの特徴と問題点
- シミュレーションの概要
- 小規模モデルによるパラメータ決定
- アモルファスSiO<sub>2</sub>/SiC構造の生成
- 界面酸化反応模擬計算
- まとめ

# SiCデバイスの特徴

- 劣悪環境でも動作する
  - 耐放射線性に優れる
  - 高電圧、高温化での動作が可能
- 熱酸化による絶縁膜形成可能
  - 従来のSiデバイスで用いられてきたプロセスが利用可能

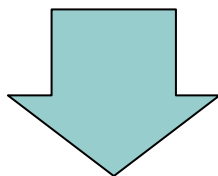


次世代極限環境デバイス  
として非常に有望

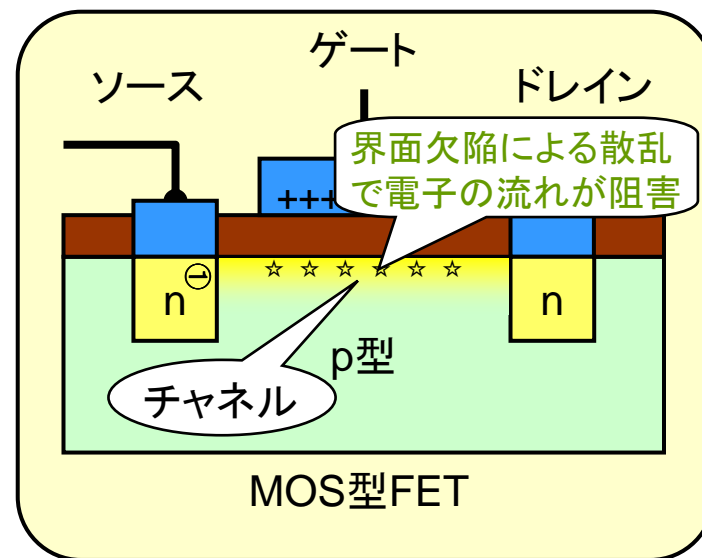


# 現状のSiCデバイスの問題点

- 酸化膜界面に存在する高密度の界面準位
  - シリコンデバイス(Si/SiO<sub>2</sub>界面)に比べてSiCデバイス(SiC/SiO<sub>2</sub>界面)では100倍以上の界面準位が存在する。
    - ⇒チャネル内電子移動度の低下
    - ⇒デバイス特性の低下



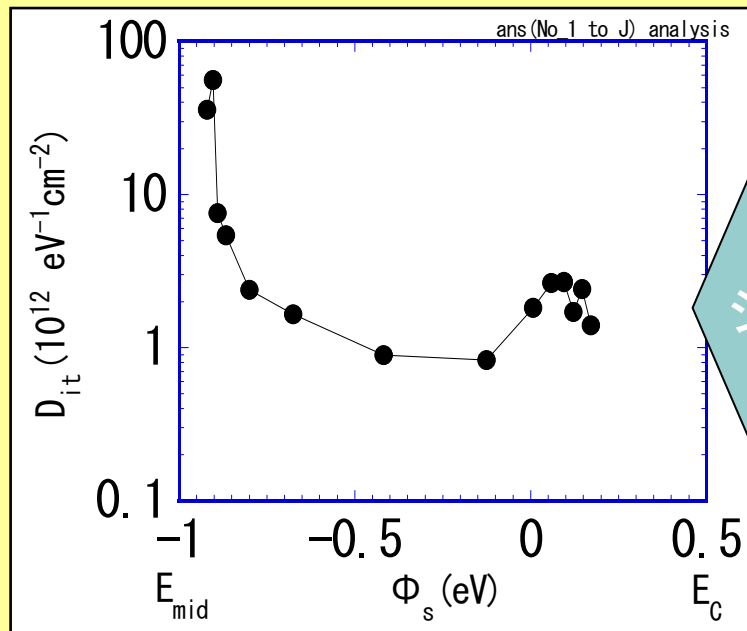
SiC/SiO<sub>2</sub>界面構造が電気特性に及ぼす影響を調べる重要性



# 界面欠陥の原因追及

- 酸化膜の電気特性と界面構造との関連付けの必要性

## 酸化膜の電気特性



欠陥荷電状態 エネルギーレベル

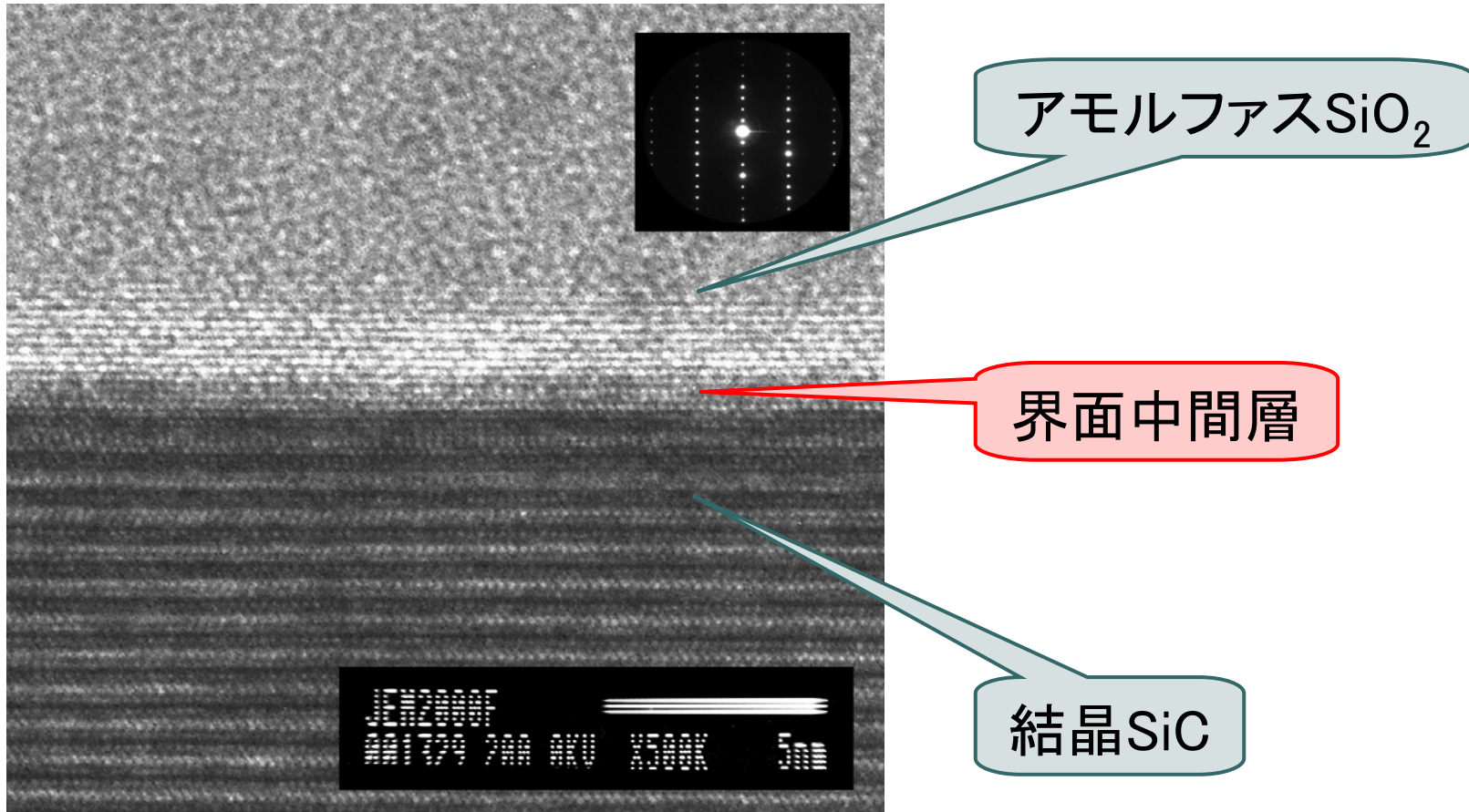
大規模  
シミュレーション  
計算

## 酸化膜界面の物理構造

Si-Si結合  
Si・ ダングリングボンド  
C・ ダングリングボンド  
C-C カーボン結合  
C-C-C カーボンクラスター

界面欠陥構造

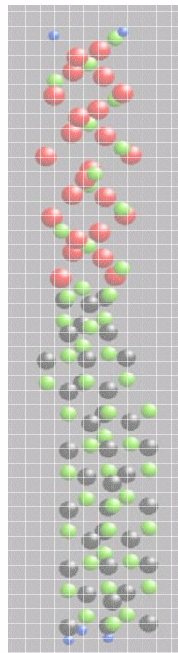
# 電子顕微鏡による界面構造観察



- 高分解能透過型電子顕微鏡(TEM)によるSiO<sub>2</sub>/SiC界面構造の断面観察像

# シミュレーションの概要

- VASP (Vienna Ab-initio Simulation Package)
  - PAW法 + 平面波
  - 一般化勾配近似(GGA)電子相関
- 加熱・急冷計算によるアモルファスSiO<sub>2</sub>生成
- 酸化反応模擬計算
  - 第一原理分子動力学計算

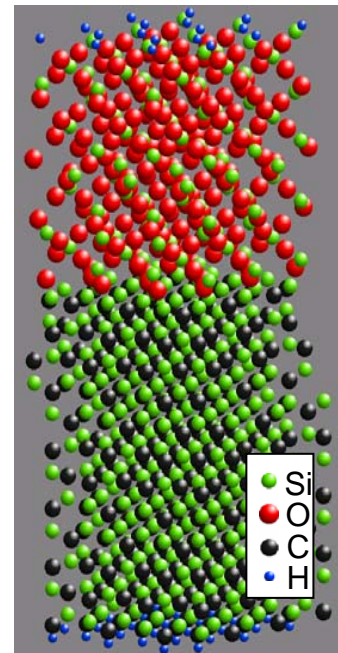


## 従来の計算モデル

- 結晶SiO<sub>2</sub>/SiCのモデル
- 総原子数は100原子程度が限界

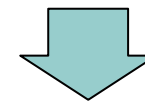


Siダングリングボンド、  
Cダングリングボンド等  
小さな欠陥構造のみが  
再現可能



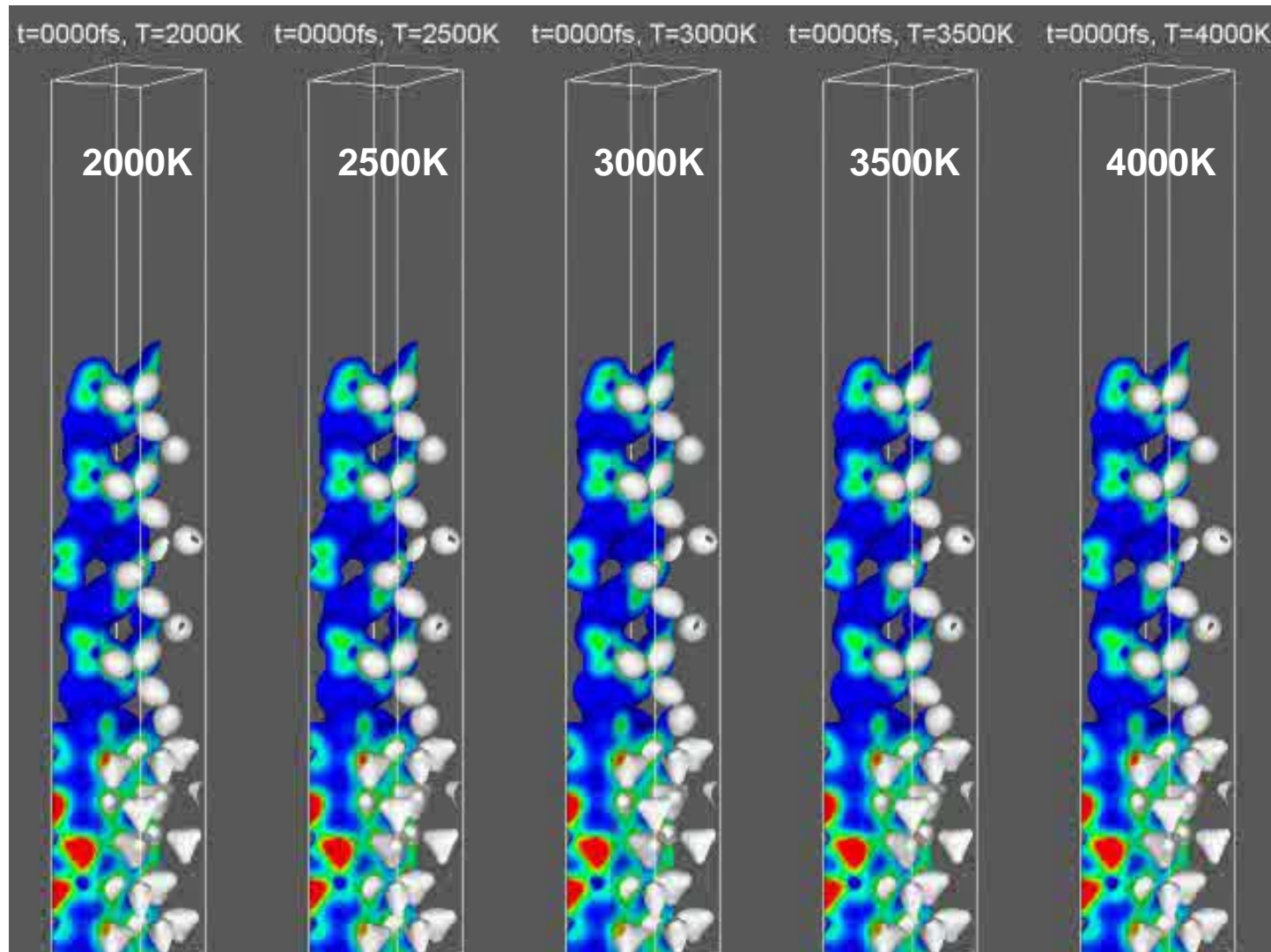
## 地球シミュレータでの計算モデル

- MD計算によって生成した  
アモルファスSiO<sub>2</sub>/SiCのモデル
- 最大で1000原子程度のモデルが  
可能



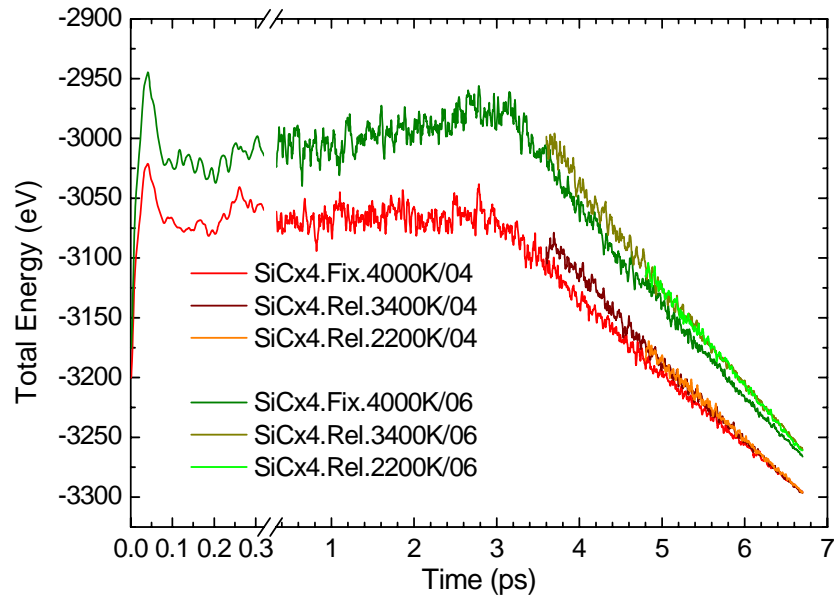
界面中間層、カーボンクラスタ  
等の**実際のデバイス**に近い  
界面構造を再現可能

# 小規模モデルでの温度条件設定 (開放終端条件)

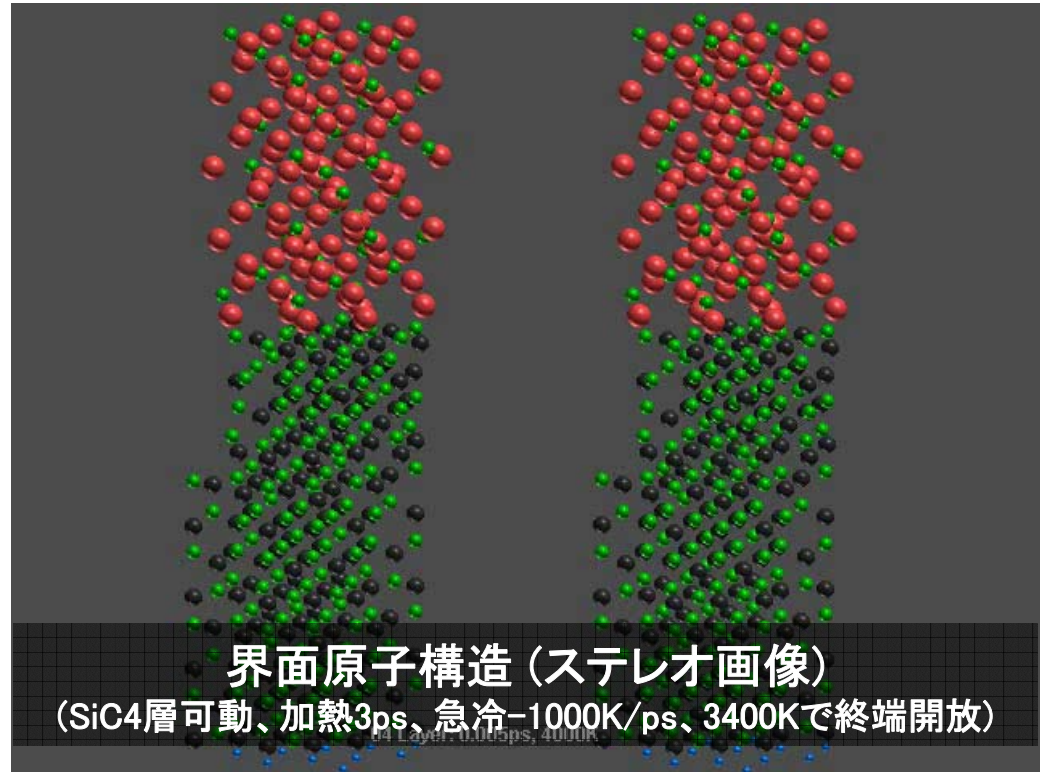


- 加熱温度2000K~4000Kでの界面電荷密度分布変化 (加熱時間3ps、急冷速度-1000K/ps)

# アモルファスSiO<sub>2</sub>/SiC界面の生成 (終端固定/開放)



加熱・急冷時の全エネルギー変化

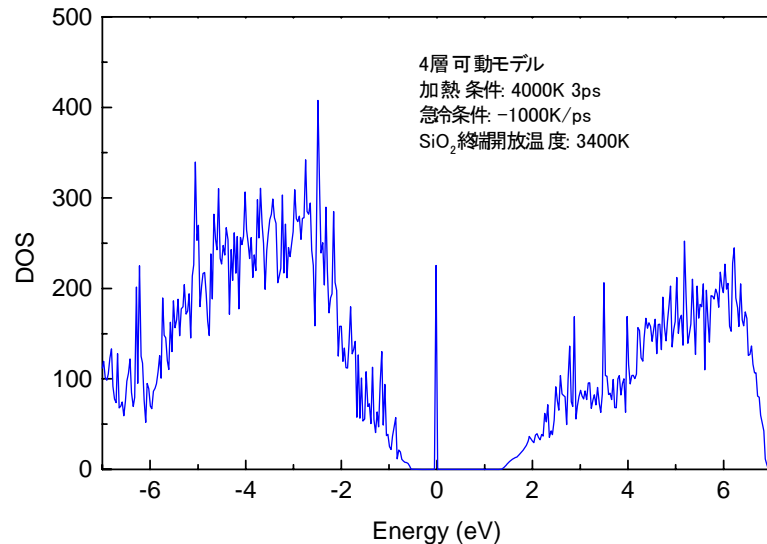


界面原子構造 (ステレオ画像)

(SiC4層可動、加熱3ps、急冷-1000K/ps、3400Kで終端開放)

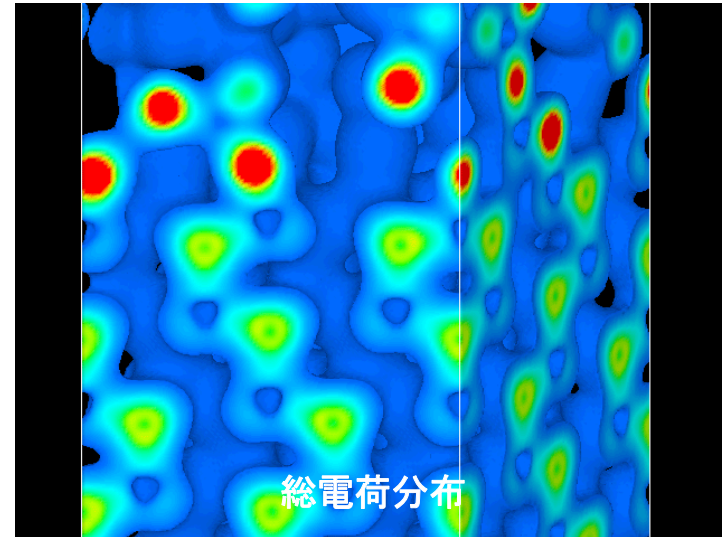
- 急冷時にSiO<sub>2</sub>終端を開放することで歪を緩和する
- 界面でのダングリングボンドが無い急峻な界面の生成
- 生成されたSiO<sub>2</sub>/Si界面構造にはほとんど欠陥は無いがわずかにSiO<sub>2</sub>中に欠陥構造が残存

# 状態密度と界面電荷密度 (3400Kで終端開放)



全電子状態密度

- 界面でのダングリングボンドが無い急峻な界面が生成された
- バンドギャップ中に欠陥準位が1つ存在する。
- SiO<sub>2</sub>中の酸素(界面から2層目)に局在している電荷分布から生じている。



総電荷分布

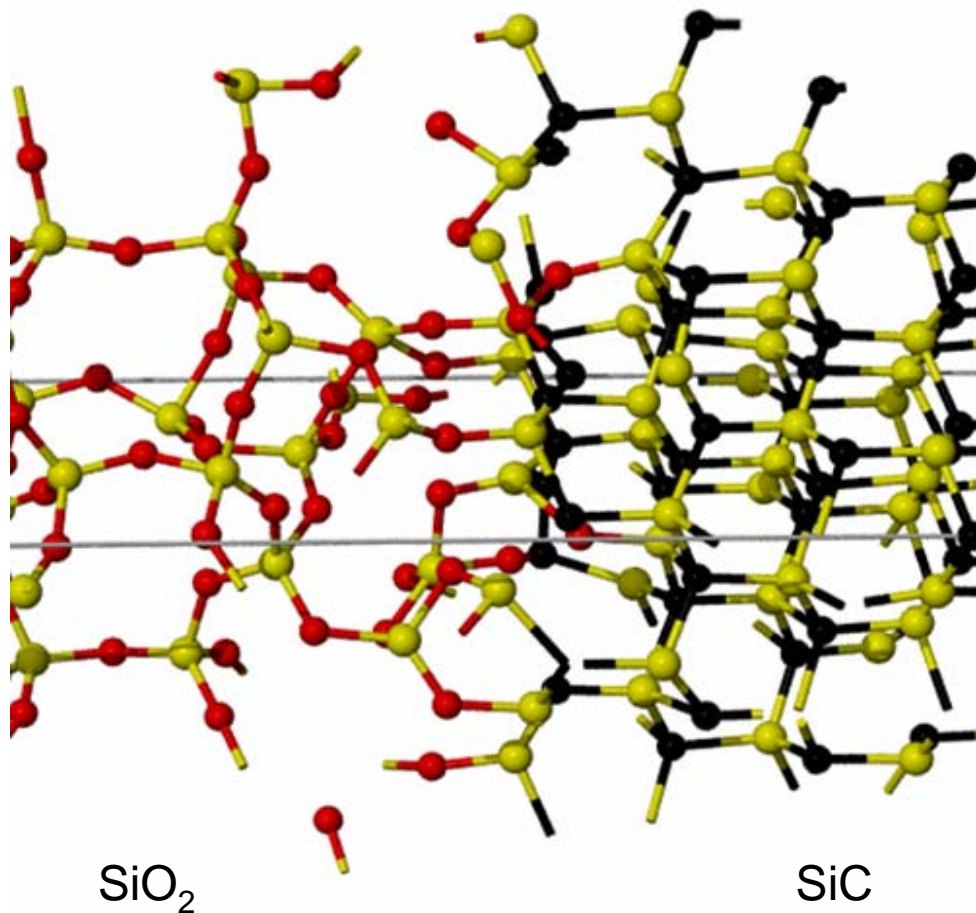


界面準位の電荷分布

# 界面酸化反応模擬計算 (2500K加熱、0.0ps~23.2ps)

8

23.2ps



- 0.0ps** 初期構造において炭素空孔がSiC界面近くに存在
- 0.0ps** 1つ目のO<sub>2</sub>分子をSiO<sub>2</sub>中の空隙に追加
- 4.0ps** 酸素分子は解離  
酸素原子が炭素空孔位置に移動
- 4.0ps** 2つ目のO<sub>2</sub>分子を追加
- 10.4ps** 酸素分子は解離  
2つ目の酸素分子がSiC層へ移動
- 10.4ps** 3つ目のO<sub>2</sub>分子を追加
- 18.4ps** 炭素クラスターを形成
- 18.4ps** 4つ目のO<sub>2</sub>分子を追加
- 23.2ps** SiC界面のSi原子が酸化され  
SiO<sub>2</sub>層へ移動

SiC酸化過程の第一原理分子動力学  
計算に世界で初めて成功

## まとめ

- 第一原理分子動力学法による大規模シミュレーションによって、 $\text{SiO}_2/\text{SiC}$ 界面欠陥構造とデバイス特性との関係を明らかにすることで、 $\text{SiC}$ デバイスの特性向上に寄与できる。
- 終端固定条件で加熱温度4000K、加熱時間3psでの融解を行い、急冷速度-1000K/psでの冷却過程において終端開放することで、界面ダングリングボンドの無い急峻なアモルファス $\text{SiO}_2/\text{SiC}$ 界面構造を生成出来た。
- $\text{SiO}_2/\text{SiC}$ 界面の酸化過程の第一原理分子動力学計算を世界ではじめて行った。
- 今後、大規模モデルを用いたシミュレーションによる実デバイス界面構造の模擬を進め、酸化反応の結果生じた界面欠陥構造と界面準位との関係を明らかにする。