18a-A17-4

分子動力学法による 4H-SiC 内のらせん転位解析

Analysis of screw dislocation in 4H-SiC by molecular dynamics

三重大院工 [1]，九大応力研 [2]　○水谷 充利 [1]，河村 貴宏 [1]，鈴木 泰之 [1]，寒川 義裕 [2]，柿本 浩一 [2]

Mie Univ. [1], RIAM, Kyushu Univ. [2] °Mitsutoshi Mizutani[1], Takahiro Kawamura[1], Yasuyuki Suzuki[1]

Yoshihiro Kangawa[2], Koichi Kakimoto[2]

E-mail: 413M152@m.mie-u.ac.jp

はじめに　4H-SiC は高い絶縁破壊電界を有するワイドギャップ半導体であり，次世代のハイパワーデバイス用材料として期待されているが，結晶成長中に形成される欠陥により材料特性の劣化を招くことが問題となっている．中でも，らせん転位は耐圧劣化・酸化膜不良・エピ欠陥の発生原因等の影響が挙げられる，しかし，欠陥構造については不明な点が多く，大口径ウエハ製作・性能向上のためには詳細な解明が求められている．本研究では古典分子動力学法を用い，4H-SiC 構造におけるらせん転位の歪エネルギーの解析を行った．

計算方法　原子間力の計算には Brenner ポテンシャル[1]を用いた．運動方程式の時間積分には Gear 法を用い，時間刻みは 1.0fs とした．温度制御には速度スケーリング法を用い，温度は 0K とした．境界条件は，a, m 軸方向の境界面の原子を固定し，c 軸方向を周期境界とした．らせん転位は，セル中心に転位線が c 軸に平行となるよう導入した．らせん転位構造導入後に 10000step の緩和計算を行い，緩和後のポテンシャルエネルギーと完全結晶のポテンシャルエネルギーの差より歪みエネルギーを算出した．

計算結果　図 1 は, バーガーズベクトル 1c のらせん転位を含むモデル(セルサイズ 123.4Å×106.7Å×40.3Å）の，各粒子の歪みエネルギーをプロットした結果である．固定された壁面粒子及び，セル中心のらせん転位部分に高い歪みエネルギーが存在していることが確認できる．図 2 は転位のバーガーズベクトルを変更した 4 モデルから転位線周り（転位中心から半径 10Å）の歪みエネルギーを抽出し, 比較したグラフである. らせん転位の持つバーガーズベクトルが増加するほど，歪みエネルギーも増加していることが分かる．また，1c, 1/4c+3/4c, 1/2c+1/2c の歪みエネルギーを比較すると，それぞれ 348.8[eV]，352.5[eV]，302.7[eV]であり，1/2c+1/2c が最も低い値となった．このことから 1/2c+1/2c 構造が最も安定であると考えられる．

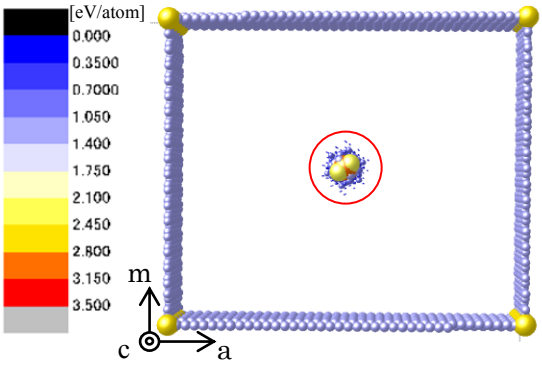

図 1　歪みエネルギー散布図

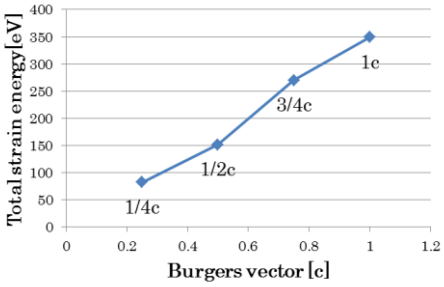

図 2　抽出部の合計歪みエネルギー比較

（c：c 軸方向の単位周期長さ）

[1] F. Gao, W. J. Weber, Nucl. Instr. and Meth. B 191 (2002) 504-508.

© 2014 年　応用物理学会