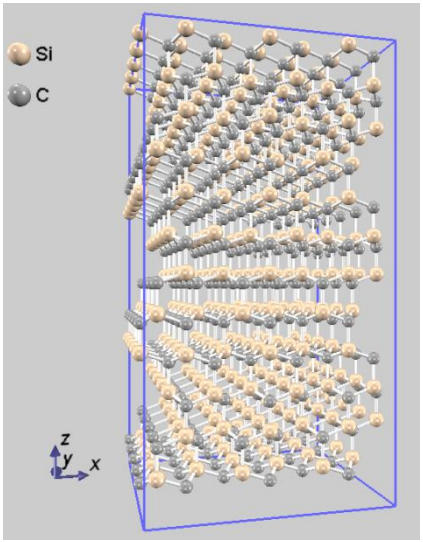
次世代 TCAD(1) 第一原理計算を用いた 4H-SiC 中の格子欠陥準位と形成エネルギーの評価

First-Principles calculations of defect levels and defect-formation energies in 4H-SiC

アドバンスソフト株式会社　○加藤信彦，岡崎一行，小池秀耀
AdvanceSoft Corp., ○Nobuhiko Kato, Kazuyuki Okazaki, Hideaki Koike
(E-mail: n-kato@advancesoft.jp)

ワイドギャップ半導体であるシリコンカーバイド(SiC)は、高周波・高出力デバイスとして期待されているが、高品質な結晶を作成することが困難であることが知られている。よって SiC を用いたデバイスの性能を最大限に引き出すためには結晶中の欠陥の生成機構を解明することが必要となる。しかし、結晶中の欠陥を原子レベルで観察することは困難であるため、SiC 結晶中の欠陥生成機構については十分な理解が得られていない。一方で、第一原理計算などの理論計算は、結晶中における欠陥周囲の原子構造や、欠陥準位などの電子状態についての解析を行うことが可能であるため、SiC 中の欠陥の生成機構に関する有用な知見を与えることができると考えられる。そこで本研究では、4H-SiC 結晶中の欠陥準位と形成エネルギーを第一原理計算を用いて解析した。第一原理計算を用いて結晶中の欠陥を計算する場合、計算セル内の欠陥が隣接する計算セル内の欠陥の影響を受けない程度に大きなスーパーセルを用いる必要があるために、計算コストが非常に大きくなってしまうため、汎用的な PC クラスター上でシミュレーションすることは困難である。そこで、Intel 社のコプロセッサーである Xeon Phi 用にチューニングされた第一原理計算ソフトウェア Advance/PHASE(Xeon-Phi 版)を使用して計算を実施した。使用した 4H-SiC のスーパーセル(720 原子)を左図に示す。格子欠陥は 4H-SiC のユニットセルの k サイトおよび h サイトから Si 原子または C 原子を 1 個抜いた 1 原子欠陥と、結合した Si-C の 2 原子を k および h サイトから抜いた 2 原子ペア欠陥サイトを考慮し、構造最適化を行った。下表に各欠陥サイトの形成エネルギーの計算結果を示す。最も形成エネルギーが低く欠陥が生成しやすいのは h サイトの C 原子に欠陥がある場合であることが分かった。また、2 原子ペア欠陥サイトは、いずれの場合も形成エネルギーに差が無く 1 原子欠陥の場合よりも生成しにくいことが分かった。これにより、4H-SiC では h サイトの C 原子位置に欠陥が生成しやすいことが分かった。発表当日は欠陥準位等の電子状態解析の結果も併せて報告する予定である。



謝辞：本研究の一部は(独)科学技術振興機構 A-STEP プログラムの助成を受けて行われた。

1原子欠陥サイト	形成エネルギー(eV)	2原子ペア欠陥サイト	形成エネルギー(eV)
kサイトSi	7.987	hサイトSi-hサイトC	8.208
kサイトC	4.505	kサイトSi-kサイトC	8.197
hサイトSi	8.051	kサイトSi-hサイトC	8.285
hサイトC	4.376	hサイトSi-hサイトC	8.254

© 2015年 応用物理学会