

4H-SiC における基底面部分転位の 貫通刃状転位への変換現象に関する反応経路解析

Reaction Pathway Analysis for Conversion of Screw Basal Plane Dislocation to Threading Edge Dislocation in 4H-SiC

東大工, °田村 陽平, 榎間 大輝, 波田野 明日可, 泉 聡志

Univ. of Tokyo, °Yohei Tamura, Hiroki Sakakima, So Takamoto, Asuka Hatano, Satoshi Izumi

E-mail: tamura.yohei@fml.t.u-tokyo.ac.jp

【はじめに】次世代パワーデバイス用半導体材料として注目を集めている 4H-SiC は、内在する基底面転位（以下 BPD : Basal Plane dislocation）によって素子性能が低下することが知られている。大半の BPD はエピタキシャル成膜時に影響の少ない貫通刃状転位（以下 TED : Threading Edge Dislocation）へと変換されるが、BPD の中でもらせん転位のうちわずかな割合は変換されず、エピ膜内に残存している¹。本研究では、らせん BPD の TED への変換現象のメカニズム解明を目的として原子間ポテンシャルによる反応経路解析を行った。

【1. BPD 部分転位対の収縮現象】BPD は結晶内で部分転位対に分かれて存在しており、TED への変換の前に収縮する必要がある。表面がもたらす鏡像力によって転位対の拡張幅が減少することが予測されているが、連続体過程の成り立たない範囲における収縮現象については明らかではない。今回、構造安定性 (Fig. 1) およびエネルギー障壁 (Fig. 2) の観点から表面が部分転位対の拡張幅に与える影響を解析した。結果として、表面極近傍 (<1nm) で転位対の収縮が促進されることを明らかにした。さらに、Si 面近傍の方が C 面近傍よりも収縮現象が起きやすいことがわかり、転位芯の構造から理由を明らかにした。

【2. BPD 完全らせん転位の交差すべり】らせん BPD は完全転位に収縮した後、鏡像力を借りて交差すべりをし、TED へ変換すると予測されている。しかし 4H において柱面は第一すべり面ではなく、交差すべりのメカニズムは明らかではない。今回、らせん BPD の交差すべりについて反応経路解析を行い、表面が交差すべりに与える影響と交差すべりのメカニズムを明らかにした。結果として表面に転位が近づくにつれ交差すべりが起きやすく、さらに C 面の方が Si 面よりも交差すべりが起きやすいことがわかった。また、交差すべりにおける転位芯の遷移過程 (Fig. 3) は C (グライドセット)-B(グライドシャフルミックス)-A(シャフルセット)-C(グライドセット)であることを明らかにした。さらに C-B 遷移過程が

律速過程であることがわかり、この過程での構造変化から C 面の方が Si 面よりも交差すべりが起こりやすい理由を明らかにした。

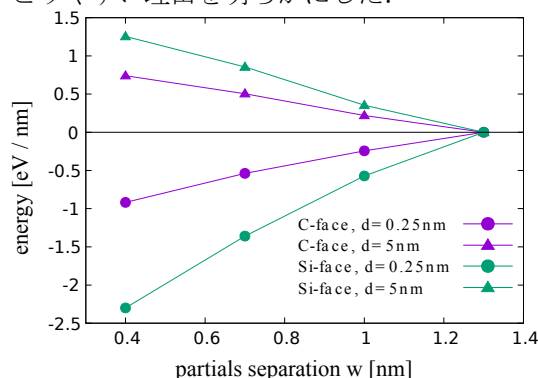


Fig. 1 Energy difference, relative to the BPD partials, as a function of the separation w . d indicates distance between dislocation and surface.

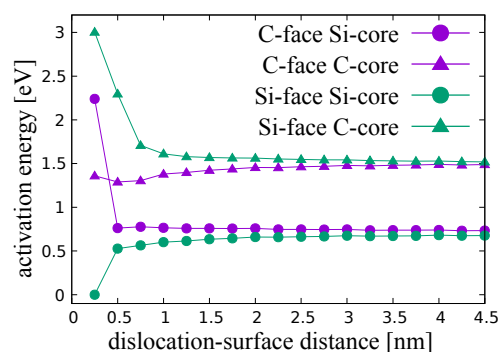


Fig. 2 Activation energy of the four 30° partials moving versus distance between dislocation and surface.

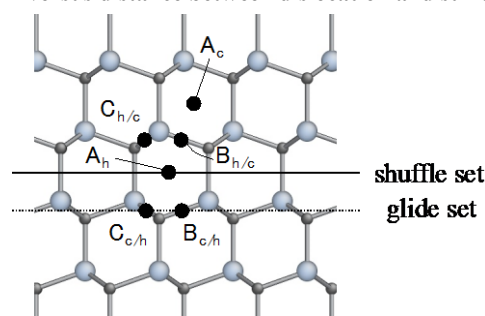


Fig. 3 4H-SiC structures projected along pertinent orientations for screw BPD, $[11-20]$.

- Kimoto, T. *Jpn. J. Appl. Phys.* **54**, 40103 (2015).