

4H-SiC における表面形状が基底面部分転位対の 収縮・拡張に与える影響の解明

Influence of surface morphology on Contraction or Expansion of Basal Plane Partial Dislocations in 4H-SiC

東大工, °平能 敦雄, 榎間 大輝, 波田野 明日可, 泉 聡志

Univ. of Tokyo, °Atsuo Hirano, Hiroki Sakakima, Asuka Hatano, Satoshi Izumi

E-mail: hirano.atsuo@fml.t.u-tokyo.ac.jp

4H-SiC結晶中に存在する基底面転位(以下BPD)は僅かにオフ角をつけてエピタキシャル成長を行うことで貫通刃状転位(以下TED)へと変換(BPD-TED変換)させ、低減させている[1]. しかしながら変換されずにわずかに残ったBPDが、伸展してデバイスの性能を低下させる. さらにBPDの低減のためにはBPD-TED変換現象の解明が必要であるが、表面付近の複雑な現象であることから、変換メカニズムの解明は未だ行われていない.

SiC結晶中のBPDは2本の部分転位に別れて存在している. BPD-TED変換は、2本の部分転位が収縮し完全らせん転位となり、交差すべりをするにより生じる. 過去の研究では、表面極近傍においては、エネルギーとエネルギー障壁の観点から、BPD部分転位対は収縮が起こりやすいということが明らかになった[2]. また、表面近傍では完全BPDの交差すべりが起こりやすいということを示した[2].

BPD-TED変換率に影響を与える要因の1つとして、成膜時のオフ角といった表面形状が挙げられる[3]. そこで本研究では、ステップ付きのより現実的なモデルを用い、成膜時のオフ角が部分転位対の収縮に与える影響について着目した.

Fig. 1のようなモデルにおいて、Fig. 2(a)に示したバーガースベクトルを有する 30° C core - 30° Si core部分転位対を導入する. 本解析では、ステップからの距離 l の部分にキンクが生成するまでの反応経路解析を行うことで、ステップからの距離 l が転位対の収縮・拡張に与える影響を調べた. 解析結果の一例として、C面における拡張幅が約2.53 nmのときの距離 l と活性化エネルギーの関係をFig. 3に示す. 解析の結果、Cコアの部分転位では、距離 l が小さくステップ近傍でキンクが生成するときほど、収縮時と拡張時の活性化エネルギーの差が小さくなった. 従って、部分転位対の収縮はステップから離れた位置で起こりやすい.

転位の歪エネルギーはらせん方向で最も低くなることから、表面へと出た転位にはバーガース

ベクトルと平行になろうとする力が加わる[4]. 従って本解析では、ステップ付近の部分転位対には拡張方向の力が生じ、ステップに近い部分ほど収縮が起こりづらくなったと考えられる.

以上の結果より、Fig. 2(a)のバーガースベクトルを有する部分転位対では、成膜時のオフ角が小さくテラス面長さが長いほど収縮が起こりやすいと考えられる. 一方、Fig. 2(b)のようなバーガースベクトルを有する場合には、上記とは逆の結果となり、MDシミュレーションによるNVT計算でも収縮が起こりやすかった.

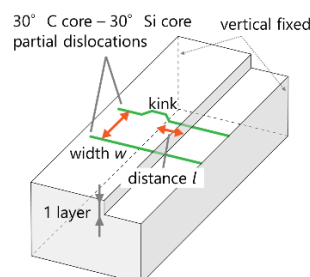


Fig. 1 Schematic illustration of simulation model

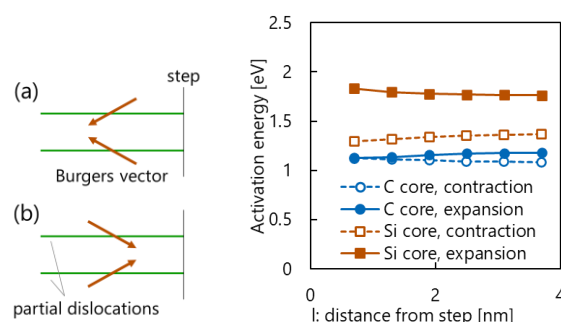


Fig. 2 Burgers vector of partial dislocations

Fig. 3 Relationship between distance l and Activation Energy (C face, width of dislocations = 2.53 nm)

- [1] T. Kimoto and J. Suda, J. Vac. Soc. Jpn. 54, 362-368 (2011).
- [2] Y. Tamura, et al., Jpn. J. Appl. Phys. 58, 081005 (2019)
- [3] W. Chen, M. A. Capano, J. Appl. Phys. 98, 114907 (2005).
- [4] H. Saka, J. Vac. Soc. Jpn., Vol. 60, No. 8 (2017)