

## 4H-SiC(0001) 表面近傍における炭素空孔の取り込みやすさの解析 Analysis of ease of incorporating carbon vacancies near the surface of 4H-SiC(0001)

名大院工<sup>1</sup>, ニューフレアテクノロジー<sup>2</sup>, 東工大未来研<sup>3</sup>

○(M1) 中島 響<sup>1</sup>, 醍醐 佳明<sup>2</sup>, 水島 一郎<sup>2,3</sup>, 依田 孝<sup>2,3</sup>, 長川 健太<sup>1</sup>, 白石 賢二<sup>1</sup>

Nagoya Univ.<sup>1</sup>, NuFlare Technology, Inc.<sup>2</sup>, FIRST, Tokyo Institute of Technology<sup>3</sup>

°H. Nakashima<sup>1</sup>, Y. Daigo<sup>2</sup>, I. Mizushima<sup>2,3</sup>, T. Yoda<sup>2,3</sup>, K. Chokawa<sup>1</sup>, K. Shiraishi<sup>1</sup>

E-mail: nakashima.hibiki@f.mbox.nagoya-u.ac.jp

### 1. はじめに

4H-SiC はその優れた物性のためシリコンの代替となる半導体として注目されている。しかし現在のエピタキシャル成長で得られる SiC には多数の結晶欠陥が含まれており、物性から期待される高い性能を十分に発揮することができていない。中でも炭素空孔は  $Z_{1/2}$  センターや  $EH_{67}$  センターといった深い準位に関わっていると考えられており、キャリアのライフタイムを短くする要因とされている。そのため工業上、炭素空孔が SiC 内に含まれるのは望ましくない。

そこで本研究では 4H-SiC の表面に生じた炭素空孔がバルク内部に取り込まれるか、または表面に留まるかを第一原理計算によって調べる。

### 2. 計算モデル・条件

本研究では密度汎関数法による第一原理計算ソフトである VASP(Vienna Ab initio Simulation Package)を用い[1-4]、交換相関汎関数は PBE 汎関数を用いた[5]。

計算モデルは、結晶成長中に存在しうる 4H-SiC を網羅的に調べるために以下のような違いを考慮して工業的に重要とされている Si 面を有している  $4 \times 4$  表面、SiC 14 bilayer のスラブモデルを作成した。

- 4H-SiC の積層構造の違い
- 吸着する原子種による表面構造の違い

吸着する原子は Si、H を考え、ここに ideal モデ

ルを加えた計 3 種類の表面構造をもつモデルを計算対象とした。ただし表面に Si が吸着する場合は、Si が吸着するサイトと炭素空孔を作る位置が対称性の観点から数種類考えられるためこれらの組み合わせについても計算を行った。

### 3. 結果

前述のモデルについて構造最適化を行った結果、H 終端モデル、Si 終端モデル、ideal モデルのいずれも最表面に炭素空孔がいるときにエネルギーが最も低く、深い層に炭素空孔が存在する場合はエネルギーが高いことが分かった。しかし H 終端モデルは他のモデルと比較して、最表面と深い層に炭素空孔が存在する各場合のエネルギーの差が低かった。以上の結果から H で終端された 4H-SiC はその他の表面構造よりも深い層に炭素空孔を取り込む可能性があることが分かった。

当日の講演では n 型 SiC のドーパントである窒素が存在する中での炭素空孔の取り込みやすさの変化についても話す予定である。

### 参考文献

- [1] G. Kresse and J. Hafner, Phys. Rev. B **47**, 558 (1993).
- [2] G. Kresse and J. Hafner, Phys. Rev. B **49**, 14251 (1994).
- [3] G. Kresse and J. Furthmüller, Comput. Mat. Sci. **6**, 15 (1996).
- [4] G. Kresse and J. Furthmüller, Phys. Rev. B **54**, 11169 (1996).
- [5] G. Kresse, and J. Joubert, Phys. Rev. B **59**, 1758 (1999).