

4H-SiC における基底面部分転位対の 表面近傍での収縮・拡張時の反応経路解析

Reaction Pathway Analysis for 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[2]。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。さらなる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、部分転位対の収縮と交差すべりへの表面の影響に着目し、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が明らかにした[3]。

本研究では、部分転位対が収縮する過程において、より現実的なモデルにてステップやテラスと転位との相互作用を明らかにした。表面から部分転位対までの距離や拡張幅ごとに部分転位対が拡張・収縮する時のエネルギー障壁を算出した。

まず初めに、Fig. 1のモデルにて、テラス面から転位対までの距離 d と部分転位対の収縮・拡張との関係を明らかにした。古典分子動力学法に基づくNEB (Nudged Elastic Band)法による反応経路解析を用い、転位にキンクが生成されるまでの活性化エネルギーを算出した。一例として、C面での拡張幅が約0.94 nmのときの距離 d と活性化エネルギーの関係をFig. 2に示す。解析の結果、表面極近傍では、収縮時の方が拡張時よりも活性化エネルギーが小さく、表面極近傍ではSiコアの活性化エネルギーが収縮時、拡張時ともに大きいことが分かった。

次に、キンク生成位置とステップの距離 l に着目し、Fig. 3のモデルにて、距離 l と、部分転位対の収縮・拡張との関係を明らかにした。一例として、C面において、拡張幅が約0.94 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。

この結果、Siコアにおいて距離 l が小さくなるほど僅かに活性化エネルギーが小さくなるものの、ほとんど変化しなかった。

以上より、表面極近傍では、Cコアの方がSiコアよりも移動しやすく、この結果は分子動力学シミュレーションを用いた動力学計算の結果とほぼ一致していた。また、距離 l にはほとんど依存しないということが分かった。

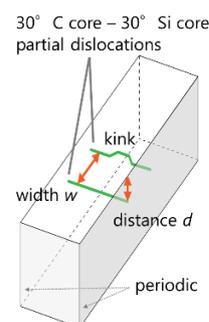


Fig. 1 Schematic illustration of simulation model

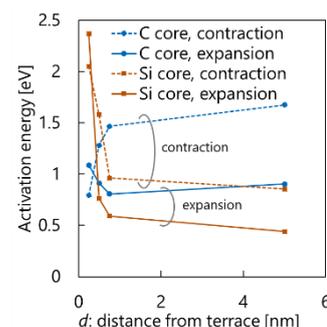


Fig. 2 Relationship between distance d and Activation Energy (C face, width of dislocations = 0.94 nm)

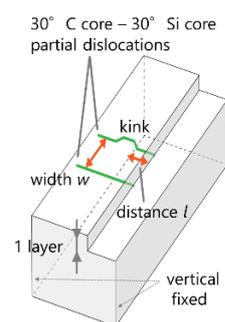


Fig. 3 Schematic illustration of simulation model

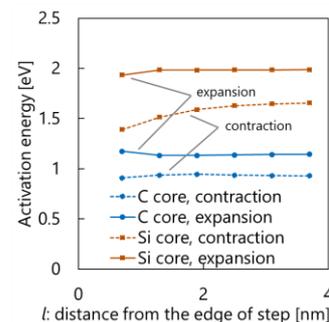


Fig. 4 Relationship between distance l and Activation Energy (C face, width of dislocations = 0.94 nm)

[1] T. Kimoto, Jpn. J. Appl. Phys. 54, 040103 (2015).

[2] T. Kimoto and J. Suda, J. Vac. Soc. Jpn. 54, 362-368 (2011).

[3] Y. Tamura, et al., Jpn. J. Appl. Phys. 58, 081005 (2019)