

4H-SiC における基底面部分転位対の収縮に ステップが与える影響の解明

Influence of steps in the surface on Contraction 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、C面、Si面ともに、表面極近傍にBPD部分転位対が存在するときには収縮した状態の方がエネルギーが低く、収縮時のエネルギー障壁も低いことから、転位対の収縮が起こりやすいということが明らかになった[2][3]。

BPD-TED変換率に影響を与える要因はいくつかあるが、その一つに表面形状が挙げられる。表面には数nmにもなるマクロステップが生じる場合がある[4][5]。部分転位対の一端は表面へと出ていることから、こうしたマクロステップは部分転位対の収縮に影響を与える可能性が高い。そこで本研究では、転位対の一端が表面へ出た位置に存在するステップの高さに着目し、ステップの高さと転位対の収縮の関係を明らかにするために分子動力学による解析を行った。

解析では、Fig. 1のようなモデルにおいて、表面と転位対までの距離が0.25 nmとなる位置に(a)または(b)のバーガースベクトルをもつ30° C core - 30° Si core部分転位対を配置した。ステップの高さを変化させ、それぞれの場合について転位対が収縮または拡張するときの活性化エネルギーをNEB法によって算出した。

一例として、転位対幅が0.94 nmのときのCコアの解析の結果をFig. 2に示す。2つのバーガースベクトルがFig. 1 (a)のようなステップに対して開い

ている場合、ステップの高さが大きくなると転位対が収縮するときの活性化エネルギーが高くなり、収縮が起こりづらくなった。一方、(b)のようにステップに対して閉じている場合はステップの高さが大きくなると収縮時の活性化エネルギーが低くなった。一般に転位対が表面へと出た部分付近にはバーガースベクトルと平行になろうとする力がはたらく[6]が、ステップの高さが高くなるほどこの力が大きくなっていると考えられる。

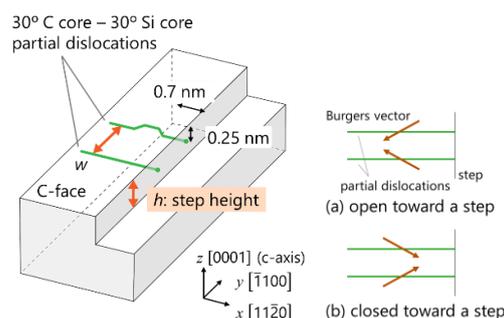


Fig. 1 Schematic illustration of simulation model and Burgers vectors of partial dislocations

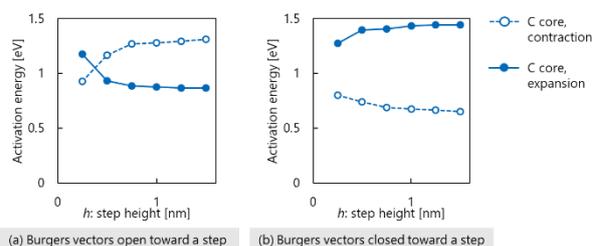


Fig. 2 Dependence of activation energy on step height h in the case of C-core.

- [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] 平能敦雄ほか, 2020年第81回応用物理学会秋季学術講演会 (2020)
- [4] T. Kimoto et al., Appl. Phys. Lett. 66, 3645 (1995)
- [5] N. Ohtani et al, J. Cryst. Growth 210, 613-622 (2000)
- [6] H. Saka, J. Vac. Soc. Jpn., Vol. 60, No. 8 (2017)