

4H-SiC における基底面転位の収縮に 表面が与える影響解明のための転位動力学解析

Dislocation Dynamics Analysis for Contraction of Basal Plane Dislocations near the surface in 4H-SiC

東京理科大学¹ °平能 敦雄¹, 高橋 伸¹, 高橋 昭如¹

Tokyo University of Science¹, °Atsuo Hirano¹, Noboru Takahashi¹, Akiyuki Takahashi¹

E-mail: hirano.atsuo@rs.tus.ac.jp

【はじめに】パワー半導体材料である 4H-SiC の課題に、結晶中の基底面転位 (BPD: Basal Plane Dislocation) の存在がある。多くは貫通刃状転位へ変換される (BPD-TED 変換) [1]が、一部は残存しデバイス性能を低下させる[2]. 従って、変換メカニズムの解明は不可欠である。本研究では、変換現象の過程の 1 つである、BPD の部分転位対が表面付近で完全転位へ収縮する過程に着目する。これまで、原子シミュレーションである古典分子動力学法での解明が試みられたが、原子間ポテンシャルの再現性や扱える空間スケールに課題があった[3]. そこで本研究では、転位をモデリングし転位論に基づき転位の運動を解析する転位動力学法を用いた解明を行った。

【手法・結果】本研究では表面が部分転位対の平衡距離に与える影響を算出した。表面力 $t=0$ という境界条件を満たすために、「修正応力場」を算出し元の応力場に重ね合わせる (Fig. 1). これにより、表面が転位に与える影響を精度良く再現できる。二次元モデルでの解析の結果、部分転位対が表面に近づくほど平衡距離が小さくなった (Fig. 2). これは、転位が表面に近づくほど表面による修正応力が大きくなり、転位間に強い引力がはたらくためである。さらに本手法を三次元へと拡大し、実際の成膜環境に近いオフ角が付いたモデルで同様の解析を行った。その結果、表面付近で収縮が起りやすいという結果が得られた (Fig. 3). さらに、転位対の種類やオフ角によって、収縮の起りやすさが変わった。以上の結果は、表面近傍で部分転位対が収縮し、TED への変換が起りやすくなることを示唆している。

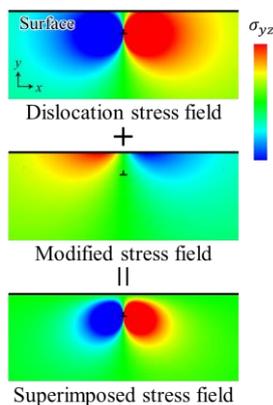


Fig. 1 Superposition of stress field

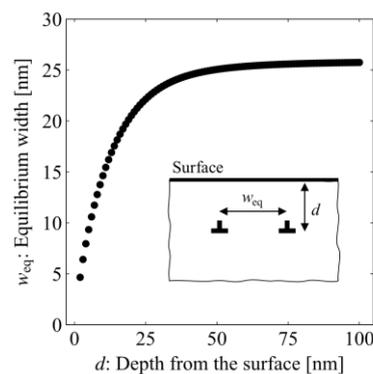


Fig. 2 Relationship between w_{eq} and d in 2D model

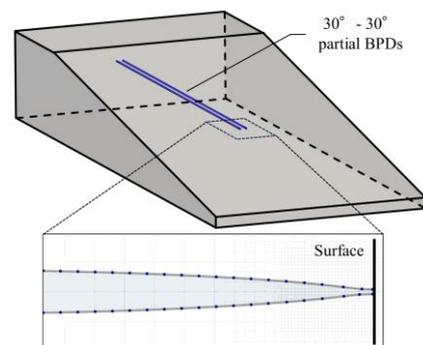


Fig. 3 Dislocations pair near the surface in 3D model

[1] S. Ha, et al., J. Cryst. Growth., 244, 257 (2002). [2] T. Kimoto, et al., IEEE IRPS, pp. 2A-1.1-2A-1.7 (2017).

[3] A. Hirano, et al., Comput. Mater. Sci., 231, 112588 (2024).