

# 4H-SiCにおけるBPD部分転位対の 挙動解明のための転位動力学解析

Dislocation dynamics analysis for elucidating the behavior of BPD partial dislocation pairs in 4H-SiC

高橋伸<sup>1)</sup>, 平能敦雄<sup>1)</sup>, 高橋昭如<sup>1)</sup>

Noboru Takahashi, Atsuo Hirano and Akiyuki Takahashi

1) 東京理科大学 創域理工学部 機械航空宇宙工学科 (〒278-8510 千葉県野田市山崎2641)

The basal plane dislocation (BPD) in the epitaxial layer is one of the major problems in 4H-SiC since they degrade the device performance. Although most of BPDs are converted into the harmless threading edge dislocations (TED) (BPD-TED conversion), some BPDs are still remain. Therefore, it is crucial to elucidate the mechanism of the conversion. Since BPDs typically exist as pairs of 30°–30° and 30°–90° partial dislocations, elucidating the behavior of these partial dislocation pairs is essential. In this study, 2D dislocation dynamics analysis was conducted on BPD partial dislocation pairs near the surface of 4H-SiC to elucidate the effect of the surface on them. The results indicated that the equilibrium distance of BPD partial dislocation pairs decreased as they approached the surface. Meanwhile, the translational force exerted on the whole of the dislocation pairs significantly increased for the 30°–90° partial dislocation pairs as they approached the surface, whereas it was inactive for the 30°–30° partial dislocation pairs. This result suggests that only 30°–30° partial dislocation pairs remain in the epitaxial layer, which is consistent with the previous observation.

**Key Words :** Dislocation dynamics, 4H-SiC, BPD

## 1. はじめに

シリコンカーバイド (SiC) は近年, シリコン (Si) に代替する新しいパワー半導体材料として注目されている. その実用化への課題の一つとして, エピタキシャル膜内における基底面転位 (BPD: Basal Plane Dislocation) の低減がある. BPDは移動度が高いため, 基底面内での移動に伴う積層欠陥の拡大により, デバイス性能の低下が引き起こされる[1]~[3]. SiCのエピタキシャル成膜にはステップ制御エピタキシー[4,5]という成膜法が使われている. この方法では, 基底面に対して4°から8°のオフ角をつけて成膜することで, ほとんどのBPDは貫通刃状転位 (TED: Threading Edge Dislocation) へと変換される[6,7]. TEDは移動度が小さく, デバイス性能を低下させないと考えられている[3]. しかし, 一部のBPDがTEDに変換されずに残存し, デバイス性能を低下させてしまう[1]. よって, BPDの挙動を解明することは不可欠である.

BPDは通常, 部分転位に分かれて存在しており[8], 転位線とバーガースベクトルのなす角度により, 30°–30°部分転位対と30°–90°部分転位対が存在する. 30°–30°部分転位対のみがエピタキシャル膜内に伝播しており[9,10], 部分転位対が完全転位へと収縮し, TEDへと変換される[11]. 先行研究[12,13]では, 表面極近傍で部分転位対の収縮が起こりやすく, TEDへと変換されやすいことが明らかになった. 一方で30°–90°部分転位対は, エピタキシャル膜内に残存しておらず[9,10], その原因は明らかになっていない. 現在まで分子動力学法による解析が進められてき

たが, 表面付近で全ての部分転位を精度よく再現できる原子間ポテンシャルは開発されていない. そこで本研究では, 転位論に基づいた転位動力学法により, 表面がBPD部分転位対の挙動に与える影響を解明する.

## 2. 二次元転位動力学解析の解析方法

本研究では, 転位によって生じた応力場と表面によって生じた応力場を重ね合わせることで, 転位に作用する力を計算する. その概要を図1に示す. つまり, ある点における応力 $\sigma_{ij}$ は, 無限体中での弾性相互作用による応力を $\sigma_{ij}^D$ , 表面の影響により生じた応力を $\sigma_{ij}^C$ とすると,

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ij}^D + \sigma_{ij}^C \quad (1)$$

と表せる. ここで,  $\sigma_{ij}^C$ を修正応力 (Correction stress) といい, 修正応力を可視化することで, 表面から受ける影響を可視化することができる. 表面の影響により生じた修正応力 $\sigma_{ij}^C$ はFEMによって算出する. まず, 無限体中にある転位が作る応力場を考え, 無限体中での表面の位置の面力 $t_i^\infty$ を求める. 自由表面の境界条件は面力 $t_i = 0$ であるか

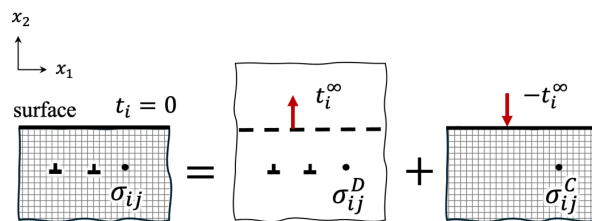


Fig. 1 Schematic illustration of superposition of stress in an infinite body and correction stress.

ら、無限体中での表面の位置の面力 $t_i^\infty$ を打ち消すように、面力 $-t_i^\infty$ を与えた時の応力場をFEMによって算出する。これによって得られた応力場が表面による応力場である。

以上の方法で計算された応力場から転位に作用する力 $f$ を、ピーチクーラーの式と積層欠陥エネルギー $\Gamma_{\text{SFE}}$ を用いて以下の式により算出する。

$$f = \sigma_{12}b_1 + \sigma_{23}b_2 + \Gamma_{\text{SFE}} \quad (2)$$

ただし、 $f$ はすべり方向に平行な成分である。転位の位置を更新し、式(2)により $f$ を計算することを繰り返すことで $f$ はある値に収束する。このとき力がつり合ったとし、力がつり合ったときの部分転位対の拡張幅を平衡距離 $w_{eq}$ とする。また、2本の部分転位それぞれに作用する力の和を、部分転位対全体に作用する並進力 $f_i$ とする。

### 3. 解析条件

はじめに、バルク中におけるBPD部分転位対の平衡距離 $w_{eq}$ と並進力 $f_i$ を算出する。その次に、表面からの深さ $d$ ごとに平衡距離 $w_{eq}$ と並進力 $f_i$ を算出し、表面との関係を明らかにした。30°-30°部分転位対と30°-90°部分転位対はそれぞれ図2のように配置した。表面からの深さ $d$ は2.0 nmから100.0 nmとした。計算の収束条件は、転位に作用する力の許容差が $1.0 \times 10^{-21}$  N/nmとした。なお本解析では、バーガースベクトルの大きさ $b=0.1782$  nm[14]、積層欠陥エネルギー $\Gamma_{\text{SFE}} = 15$  mJ[15]、弾性定数 $C_{11} = 501$  GPa,  $C_{12} = 111$  GPa,  $C_{13} = 52$  GPa,  $C_{33} = 553$  GPa,  $C_{44} = 163$  GPa[16]を用いた。

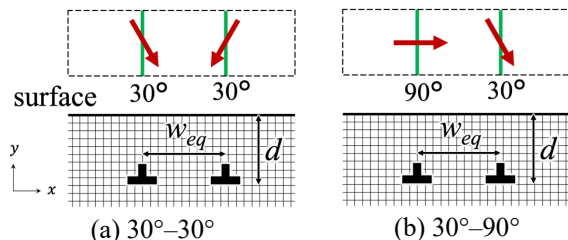


Fig.2 Burgers vectors of (a)30°-30° partial dislocation and (b) 30°-90° partial dislocation.

### 4. 解析結果

#### (1) BPD部分転位対の平衡距離

バルク中における平衡距離 $w_{eq}$ は、30°-30°部分転位対では25.90 nm, 30°-90°部分転位対では38.32 nmとなった。実際の材料の観察[17]で測定された幅は、それぞれ約30-40 nm, 約40-60 nmとなっており、30°-90°部分転位対の平衡距離の方が大きいことは本解析と一致している。

図3に表面からの深さ $d$ とBPD部分転位対の平衡距離 $w_{eq}$ の関係を示す。表面からの深さ $d$ が同じ位置では、30°-90°部分転位対の方が平衡距離 $w_{eq}$ が大きくなり、バルク中での傾向と一致した。30°-30°部分転位対は、表面に近いときには平衡距離 $w_{eq}$ も小さくなった。これは、部分

転位対が表面に近いほど、転位に働く鏡像力が大きくなるためであると考えられる。また、表面から離れるにつれ平衡距離 $w_{eq}$ が大きくなり、バルク中での解析結果 $w_{eq} = 25.90$  nmに近づいた。これは、表面から離れるほど転位に働く鏡像力が小さくなり、バルク中の状態に近づくためだと考えられる。

一方で、30°-90°部分転位対は30°-30°部分転位対とは異なり、 $2.0 \text{ nm} \leq d \leq 3.5 \text{ nm}$ ,  $15.0 \text{ nm} \leq d \leq 23.0 \text{ nm}$ で、 $d$ が大きくなるにつれ $w_{eq}$ が減少した。 $d$ が25.0 nmを超えると $w_{eq}$ は緩やかに増加し、 $d = 100.0$  nmのとき $w_{eq} = 36.21$  nmとなった。これは、バルク中での解析結果 $w_{eq} = 38.32$  nmに近い値である。30°-30°部分転位対では $d = 100.0$  nmのとき $w_{eq} = 25.83$  nmであり、バルク中との差は0.07 nmである一方、30°-90°部分転位対ではバルク中との差は2.61 nmとなった。従って、30°-90°部分転位対の方がバルク中との差が大きく、表面から離れた位置でも表面の影響を強く受けると考えられる。

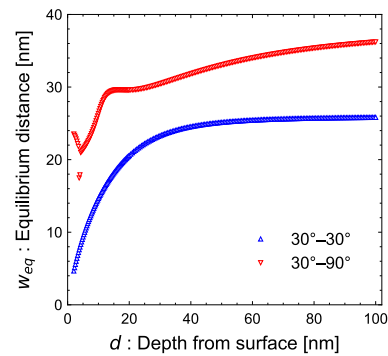


Fig.3 The relationship between the depth from the surface  $d$  and equilibrium distance  $w_{eq}$  in 30°-30° partial dislocation and 30°-90° partial dislocation.

#### (2) BPD部分転位対に作用する並進力

バルク中における並進力 $f_i$ は、30°-30°部分転位対、30°-90°部分転位対ともに作用していなかった。図4に表面からの深さ $d$ とBPD部分転位対に作用する並進力 $f_i$ の関

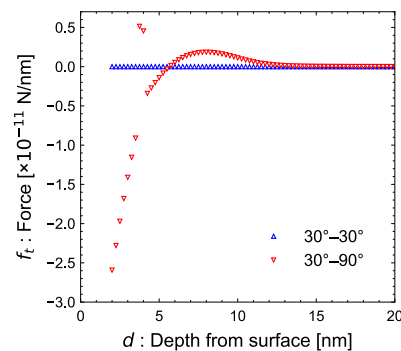


Fig.4 The relationship between the depth from the surface  $d$  and translational force  $f_i$  acting on 30°-30° partial dislocation and 30°-90° partial dislocation.

係を示す。30°-30°部分転位対では、 $d$ の大きさに関わらず  $f_t=0$  N/nmであった。従って、30°-30°部分転位対には並進力は作用しないため、エピタキシャル膜内に残存すると考えられる。一方、30°-90°部分転位対では、 $d$ が小さいほど  $f_t$ は大きくなる傾向があり、表面から離れるほど0に収束している。 $f_t$ は $d=8.0$  nmで極大値を取り、 $d=6.0$  nm付近で0に近づいているが、 $d<15.0$  nmにおいて30°-90°部分転位対に大きな並進力が作用していることが明らかとなった。従って、エピタキシャル膜内に30°-90°部分転位対が残存していないのは、表面近傍では部分転位対に大きな並進力が作用し、部分転位対全体が移動するためだと考えられる。

### (3) 修正応力の可視化

#### a) 30°-30°部分転位対

30°-30°部分転位対の表面からの深さ $d$ ごとの修正応力場 $\tau_{xy}$ を図5に示す。部分転位に作用する力は $x$ 方向であるため $\tau_{xy}$ を可視化した。図2(a)のような向きのバーガースベクトルの場合、部分転位間に負の修正応力 $\tau_{xy}$ 、外側に正の修正応力 $\tau_{xy}$ が作用している。表面から離れるにつれ、修正応力 $\tau_{xy}$ が減少しており、表面から離れるほど表面からの影響が小さくなることを確認できる。 $2.0\text{ nm} \leq d \leq 40.0\text{ nm}$ で $\tau_{xy}$ の変化が大きい、 $d=60.0\text{ nm}$ と $d=100.0\text{ nm}$ での $\tau_{xy}$ の分布の変化は見られない。これは、図3において30°-30°部分転位対の平衡距離 $w_{eq}$ が $d>40.0\text{ nm}$ で変化が小さいことと一致している。また、表面からどの深さにおいても $\tau_{xy}$ は部分転位対の中心から $x$ 方向に対称であるため、30°-30°部分転位対には並進力が作用しないと考えられる。

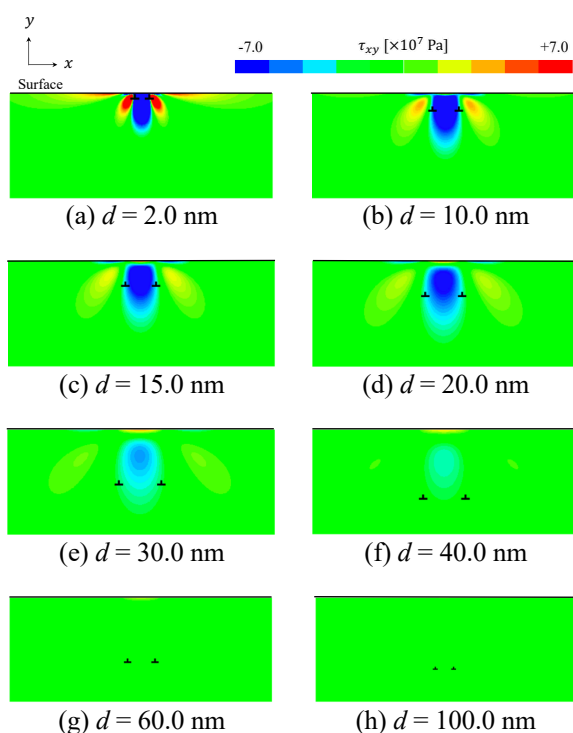


Fig.5 Correction stress  $\tau_{xy}$  around 30°-30° partial dislocation.

#### b) 30°-90°部分転位対

次に、30°-90°部分転位対の表面からの深さ $d$ ごとの修正応力場 $\tau_{xy}$ を図6に示す。図2(b)のような向きのバーガースベクトルの場合、修正応力 $\tau_{xy}$ は部分転位対の $x$ 負側に正の、 $x$ 正側に負の分布になった。30°-30°部分転位対と同様、表面から離れるにつれ、修正応力 $\tau_{xy}$ が減少しているが、 $d=60.0\text{ nm}$ 、 $100.0\text{ nm}$ における修正応力 $\tau_{xy}$ は30°-30°部分転位対よりも大きく、表面から離れた位置でも表面の影響を強く受けることが確認できる。また、部分転位間の分布で30°-30°部分転位対と異なる傾向が見られた。部分転位間では負の分布が見られるが、 $d \leq 22.0\text{ nm}$ で負の分布が非対称性を持ちながら縮小している。これは、修正応力 $\tau_{xy}$ がバーガースベクトルの $x$ 方向成分、すなわち刃状成分の大きさに依存するものであり、30°-90°部分転位対では2本の部分転位の刃状成分の大きさが異なるためであると考えられる。この部分転位間の修正応力 $\tau_{xy}$ の変化が、図3における30°-90°部分転位対の平衡距離 $w_{eq}$ が一様に増加しない原因だと考えられる。また、修正応力 $\tau_{xy}$ の非対称性が30°-90°部分転位対に並進力が作用する原因だと考えられる。

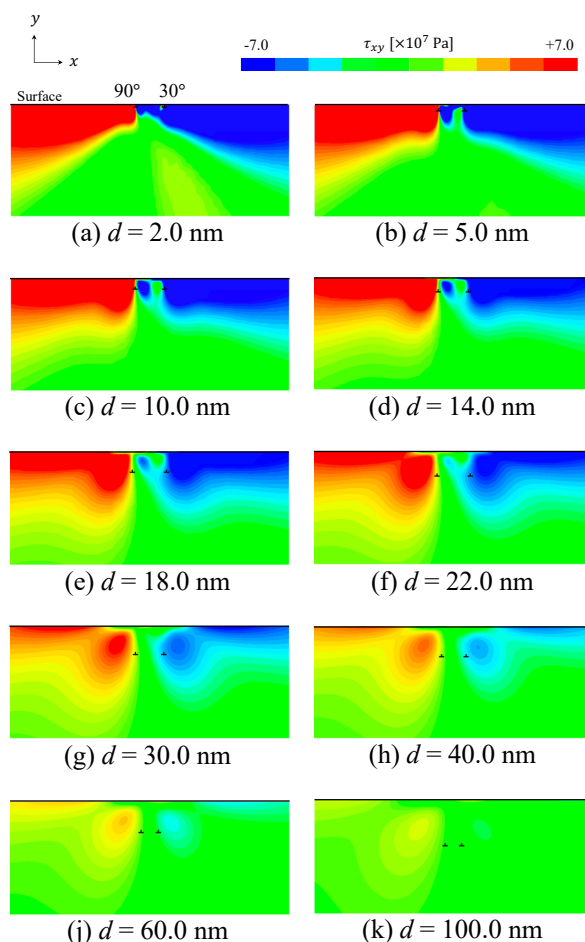


Fig.6 Correction stress  $\tau_{xy}$  around 30°-90° partial dislocation.

## 5. 結論

本研究では，二次元転位動力学解析を用いてBPD部分転位対の平衡距離と作用する並進力について，表面から部分転位対までの深さ $d$ ごとに算出した． $30^\circ$ – $30^\circ$ 部分転位対では，表面から離れるほど平衡距離はバルク中に一樣に近づいていくのに対し， $30^\circ$ – $90^\circ$ 部分転位対では， $2.0\text{ nm} \leq d \leq 3.5\text{ nm}$ ， $15.0\text{ nm} \leq d \leq 23.0\text{ nm}$ で平衡距離が減少した．また， $30^\circ$ – $30^\circ$ 部分転位対には並進力は作用していないが， $30^\circ$ – $90^\circ$ 部分転位対には表面近傍で大きな並進力が作用していることが明らかとなった．このことは， $30^\circ$ – $30^\circ$ 部分転位対のみがエピタキシャル膜内に残存することを示し，先行研究による観察結果と一致している．さらに修正応力を可視化したところ， $30^\circ$ – $30^\circ$ 部分転位対よりも $30^\circ$ – $90^\circ$ 部分転位対の方が表面から離れた位置でも表面の影響を受けることが確認できた．修正応力 $\tau_y$ は， $30^\circ$ – $30^\circ$ 部分転位対では部分転位対の中心に対して対称である一方， $30^\circ$ – $90^\circ$ 部分転位対では非対称であることが明らかとなった．

## 参考文献

- [1] Skowronski, M. and Ha, S., Degradation of hexagonal silicon-carbide-based bipolar devices, *J. Appl. Phys.*, Vol.99, No.1, 2006.
- [2] Senzaki, J., Kojima, K., Kato, T., Shimozato, A. and Fukuda, K., Correlation between reliability of thermal oxides and dislocations in n-type 4H-SiC epitaxial wafers, *Appl. Phys. Lett.*, Vol.89, No.2, 2006.
- [3] Kimoto, T., Iijima, A., Tawara, T., Otsuki, A., Tsuchida, H., Miyazawa, T., Kato, T. and Yonezawa, Y., Understanding and reduction of degradation phenomena in SiC power devices, *IEEE International Reliability Physics Symposium Proceedings*, pp.2A1.1–2A1.7, 2017.
- [4] Ueda, T., Nishino, H. and Matsunami, H., Crystal growth of SiC by step-controlled epitaxy, *J Cryst Growth*, Vol.104, No.3, pp. 695–700, 1990.
- [5] Kimoto, T., Nishino, H., Yoo, W. S. and Matsunami, H., Growth mechanism of 6H-SiC in step-controlled epitaxy, *J. Appl. Phys.*, Vol.73, pp.726–732, 1993.
- [6] Ha, S., Mieszkowski, P., Skowronski, M. and Rowland, L. B., Dislocation conversion in 4H silicon carbide epitaxy, *Journal of Crystal Growth*, Vol.244, No.3–4, pp.257–266, 2004.
- [7] Matsunami, H. and Kimoto, T., Step-controlled epitaxial growth of SiC: High quality homoepitaxy, *Materials Science and Engineering R: Reports*, Vol.20, No.3, pp.125–166, 1997.
- [8] Hong, M. H., Samant, A. V. and Pirouz P., Stacking fault energy of 6H-SiC and 4H-SiC single crystals, *Philosophical Magazine A*, Vol.80, No.4, pp.919–935, 2000.
- [9] Tsuchida, H., Ito, M., Kamata, I. and Nagano, M., Formation of extended defects in 4H- SiC epitaxial growth and development of a fast growth technique, *Phys. Status Solidi B*, Vol.246, No.7, pp.1553–1568, 2009.
- [10] Jacobson, H., Birch, J., Yakimova, R., Syväjärvi, M., Bergman, J. P., Ellison, A., Tuomi, T. and Janzén, E., Dislocation evolution in 4H-SiC epitaxial layers, *J. Appl. Phys.*, Vol.91, No.10, pp.6354–6360, 2002.
- [11] Zhang, N., Chen, Y., Zhang, Y., Dudley, M. and Stahlbush, R. E., Nucleation mechanism of dislocation half-loop arrays 4H-silicon carbide homoepitaxial layers, *Appl. Phys. Lett.*, Vol.94, No.12, 2009.
- [12] Y. Tamura, H. Sakakima, S. Takamoto, A. Hatano, S. Izumi, Reaction pathway analysis for the conversion of perfect screw basal plane dislocation to threading edge dislocation in 4H-SiC, *Jpn. J. Appl. Phys.*, Vol.58 No.8, 2019.
- [13] Hirano, A., Sakakima, H., Hatano, A. and Izumi, S., Charge-transfer interatomic potential to reproduce  $30^\circ$  partial dislocation movements for 4H-SiC in the surface vicinity and its application to BPD-TED conversion, *Computational Materials Science*, Vol.231, 2024.
- [14] Iuga, M., Steinle-Neumann, G. and Meinhardt, J., Ab-initio simulation of elastic constants for some ceramic materials, *Eur. Phys. J. B*, Vol.58, No.2, pp.127–133, 2007.
- [15] Sakakima, H., Hatano, A. and Izumi, S., Comparative study of the effect of van der Waals interactions on stacking fault energies in SiC, *J. Appl. Phys.*, Vol.130, No.21, 2021.
- [16] Kamitani, K., Grimsditch, M., Nipko, J. C., Loong, C. K., Okada, M. and Kimura, I., The elastic constants of silicon carbide: A Brillouin-scattering study of 4H and 6H SiC single crystals, *J. Appl. Phys.*, Vol.82, No.6, pp.3152–3154, 1997.
- [17] Hong, M. H., Samant, A. V. and Pirouz P., Stacking fault energy of 6H-SiC and 4H-SiC single crystals, *Philosophical Magazine A*, Vol.80, No.4, pp.919–935, 2000.