

三次元転位動力学解析を用いた 4H-SiCにおけるBPD部分転位対の挙動解明

Elucidating the behavior of BPD partial dislocation pairs
in 4H-SiC using a three-dimensional dislocation dynamics method

高橋伸¹⁾, 平能敦雄¹⁾, 高橋昭如¹⁾

Noboru Takahashi, Atsuo Hirano and Akiyuki Takahashi

1) 東京理科大学大学院 創域理工学研究科 機械航空宇宙工学専攻 (〒278-8510 千葉県野田市山崎2641)

4H-SiC is attracting attention as a next-generation power device material due to its superior electrical properties. However, basal plane dislocations (BPDs) in the epitaxial layer degrade device performance. Although most BPDs are converted into threading edge dislocations (TEDs), some BPDs still remain. Therefore, it is essential to elucidate the BPD-TED conversion mechanism. In this study, we investigated the contraction of partial BPD pairs. We employed the dislocation dynamics method to evaluate the interaction between the BPDs and the surface. In our computational model, the effects of the surface are incorporated by combining the dislocation interactions and forces due to stacking faults with the finite element method (FEM). In the three-dimensional analysis, we evaluated the off-angle dependence of the configuration of 30°–30° partial BPD pairs. We found that a smaller off-angle leads to a smaller BPD width and potentially a higher conversion rate. In addition, we clarified that the direction of the Burgers vectors affects the contraction behavior.

Key Words : Dislocation dynamics, 4H-SiC, BPD, Surface, Off-angle

1. はじめに

シリコンカーバイド (SiC) はその優れた電気的特性から、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形成される基底面転位 (BPD: Basal Plane Dislocation) の低減がある。BPDは移動度が高く、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]という成膜法が広く用いられている。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はTEDに変換されずにエピタキシャル膜内に残存し、デバイス性能を劣化原因となっている[1]。このため、BPDからTEDへの変換率の向上を目的とした多くの実験や観察が行われてきた。例えば、オフ角が8°よりも4°の方がBPDの低減に有効であることが報告されている[8,9]。しかし、表面がBPDの挙動に及ぼす影響については十分に解明されておらず、BPDの詳細な挙動を明らかにすることが依然として重要な課題である。

BPDは通常、部分転位に分かれて存在しており[10]、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いる[11,12]。

この部分転位対が表面近傍での鏡像力を受けて完全転位へと収縮し、TEDへと変換される[13]。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の挙動に与える影響を解明する。

2. 解析手法

本研究では、表面近傍の部分転位対に着目することから、1つの部分転位に作用する力 \mathbf{f} は

$$\mathbf{f} = \mathbf{f}_{\text{SF}} + \mathbf{f}_{\text{Dis}} + \mathbf{f}_{\text{Sur}} \quad (1)$$

と表される。ここで、 \mathbf{f}_{SF} は積層欠陥による力、 \mathbf{f}_{Dis} と \mathbf{f}_{Sur} はそれぞれ転位と表面によって生じるピーチケラー力である。 \mathbf{f}_{SF} の大きさは積層欠陥エネルギーと等しく、部分転位間に対して内向きの力として働く。 \mathbf{f}_{Dis} は

$$\mathbf{f}_{\text{Dis}} = (\boldsymbol{\sigma}^D \cdot \mathbf{b}) \times \boldsymbol{\xi} \quad (2)$$

と表される。ここで、 $\boldsymbol{\sigma}^D$ は転位による応力、 \mathbf{b} はバーガースベクトル、 $\boldsymbol{\xi}$ は転位線方向ベクトルである。 \mathbf{f}_{Sur} は

$$\mathbf{f}_{\text{Sur}} = (\boldsymbol{\sigma}^C \cdot \mathbf{b}) \times \boldsymbol{\xi} \quad (3)$$

と表される。ここで、 $\boldsymbol{\sigma}^C$ は表面によって生じた応力であり、本研究では修正応力と呼ぶ。図1に応力場の計算手順の概要を示す。まず、無限体中における転位による応力場 $\boldsymbol{\sigma}^D$ を転位論に基づいて計算する。次に、この応力場から

表面位置での面力 t^D を求める．表面では面力 $t^D=0$ となる境界条件を満たす必要があるため，表面に反対向きの面力 $-t^D$ を与え，これによって生じる応力場 σ^C を有限要素法（FEM）によって算出する．

本研究では，2つの部分転位の平衡な位置を求めるために，転位に作用する力 f が0となる位置を，転位動力学法を用いて算出する．

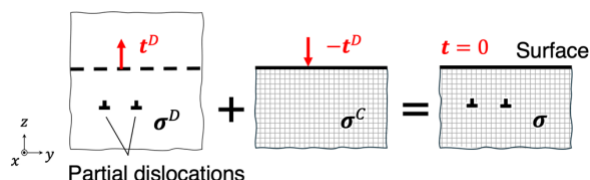


Fig. 1 Schematic illustration of superposition of stress in an infinite body and correction stress.

3. 表面からの深さとBPDの幅の関係

(1) 解析条件

二次元転位動力学解析により，表面からの深さ d ごとに部分転位対（BPD）の平衡幅 w_{eq} を算出し，表面からの距離とBPDの幅の関係を明らかにした． 30° – 30° 部分転位対および 30° – 90° 部分転位対はそれぞれ図2に示すように配置した．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前ステップとの差が 1.0×10^{-21} N/nm未満となることとした．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 $\Gamma_{SF}=15$ 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．

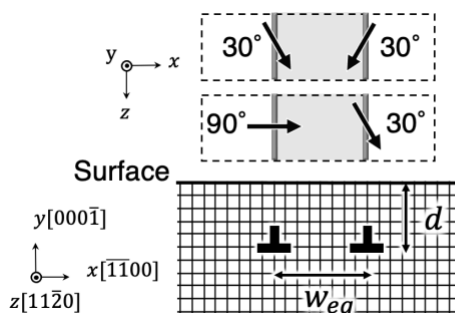


Fig. 2 Burgers vectors of (a) 30° – 30° partial dislocation and (b) 30° – 90° partial dislocation.

(2) 解析結果

図3に表面からの深さ d とBPD部分転位対の平衡幅 w_{eq} の関係を示す． 30° – 30° 部分転位対と 30° – 90° 部分転位対のいずれにおいても表面に近づくほど平衡幅 w_{eq} が小さくなる傾向が見られた．これは，表面近傍では部分転位間に働く引力，すなわち鏡像力が強くなるためであり，表面に近づくほど部分転位対が完全転位へと収縮しやすくなることを示している．また，どの深さ d においても 30° – 30° 部分転位対の平衡幅 w_{eq} は 30° – 90° 部分転位対に比べて小さい

ことがわかった． $d=2.0$ nmの条件では， 30° – 30° 部分転位対の平衡幅 w_{eq} は4.65 nm， 30° – 90° 部分転位対では12.76 nmであった．この結果から， 30° – 30° 部分転位対の方が 30° – 90° 部分転位対よりも表面近傍での収縮が起きやすいことが考えられる．

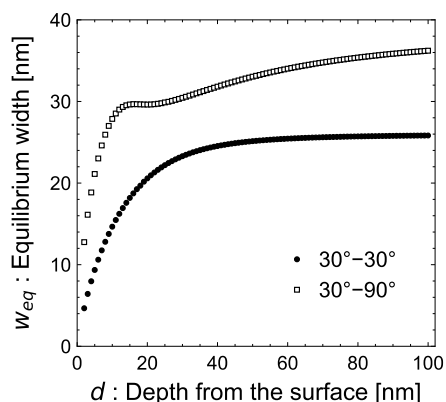


Fig. 3 The relationship between the depth from the surface d and equilibrium distance w_{eq} in 30° – 30° partial dislocation and 30° – 90° partial dislocation.

4. BPD形状の三次元転位動力学解析

(1) 解析条件

オフ角を再現するため，図4に示すオフ角 θ を持つ三次元モデルを用いた．転位周りの表面近傍のメッシュを細かく設定し，メッシュサイズは1.48 nmとした．拘束条件として， $z=0$ 面の z 方向変位を0， $x=0$ 面の x 方向変位を0にし，それ以外の面は自由境界とした．三次元転位動力学解析では，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]からVoigt平均を用いて等方性の材料定数を算出し，せん断弾性係数 $\mu=194$ GPa，ポアソン比 $\nu=0.16$ の等方性を仮定した．オフ角 θ は基底面と表面のなす角度を示し， $\theta=4^\circ, 8^\circ, 12^\circ, 16^\circ$ の場合について解析を行った．BPDは基底面上に配置し，一端は拘束し，もう一端は表面上に配置した．BPDの初期幅は29.6 nmであり，これは等方性材料中での平衡幅に相当する．また，図5に示すように，表面に対して閉じる方向と開く方向のバーガースベクトルを持つ，2種類の 30° – 30° 部分転位対を用いた．計算の収束条件は，積層欠陥の面積変化が前ステップとの差で 0.5 nm²未満となることを基準とした．

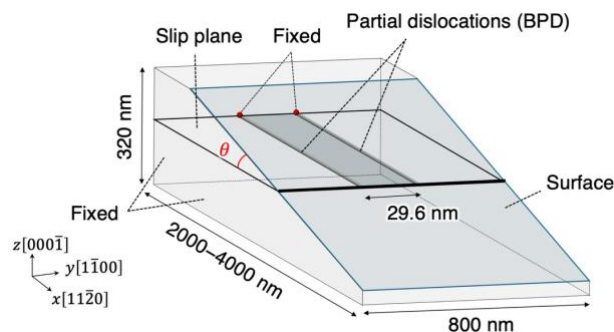


Fig. 4 Schematic illustration of the model used for 3-dimensional dislocation analysis.

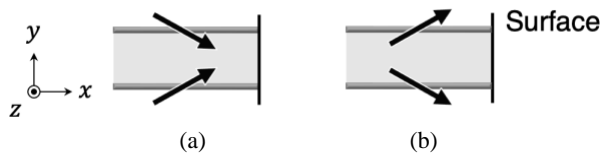


Fig. 5 Type of Burgers vectors for this calculation.
(a) open toward the surface, (b) closed toward the surface

(2) 解析結果

図6にオフ角が 8° における 30° – 30° 部分転位対の形状を示す。(a)はバーガースベクトルが表面に対して閉じている場合、(b)は開いている場合である。バーガースベクトルが表面に対して閉じている場合では、部分転位対が表面近傍で収縮している。一方で、バーガースベクトルが表面に対して開いている場合では、表面から離れた位置で収縮している。

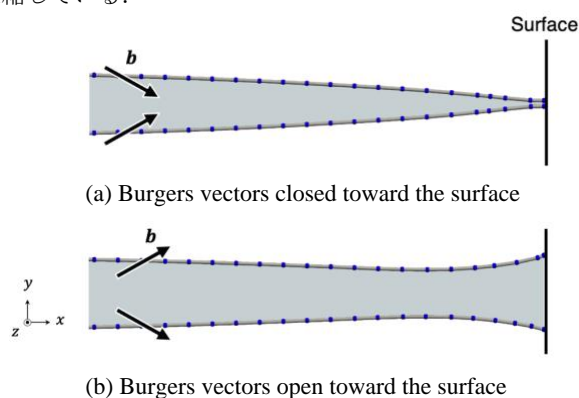
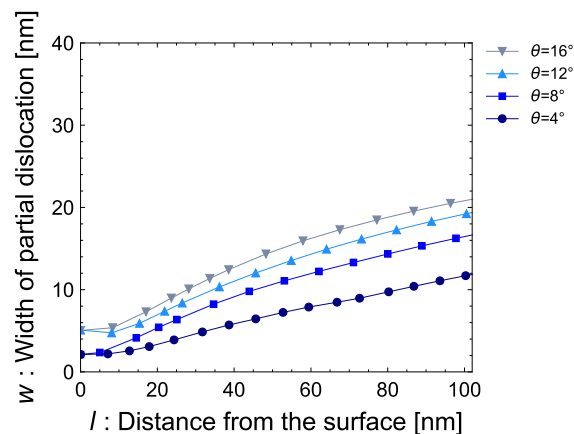


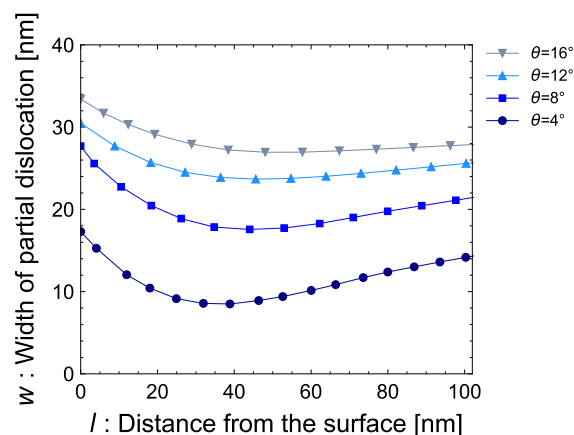
Fig. 6 Configuration of the 30° – 30° partial dislocation pair at an off-angle of 4° .

図7に、表面から x 方向の距離 l と、その位置における 30° – 30° 部分転位対の幅 w との関係を示す。図7から、オフ角 θ が小さくなるにつれて、幅 w が減少していることがわかる。これはオフ角が小さいほど、部分転位対と表面との距離が近くなり、より強い鏡像力が作用するためである。この傾向は、図3の結果とも一致している。したがって、オフ角が小さいほどBPDは完全転位へと収縮しやすく、TEDへの変換が促進されると考えられる。この結果は、先行実験[8,9]とも整合している。

また、オフ角 θ に関わらず、バーガースベクトルの向きによって部分転位対の形状には異なる傾向が見られる。バーガースベクトルが表面に対して閉じている場合には、部分転位対は表面近傍で収縮しているのに対し、開いている場合には、表面から離れた位置で収縮している。さらに、部分転位対の幅は開いている場合の方が大きい。よって、バーガースベクトルが表面に対して閉じている場合の方が、より完全転位へと収縮しやすいと考えられる。



(a) Burgers vectors closed toward the surface



(b) Burgers vectors open toward the surface

Fig. 7 Relationship between the distance l from the surface and the partial BPD width w .

(3) 表面の影響の可視化

図8に、オフ角が 8° におけるらせん転位と刃状転位の周囲に生じる修正応力場 σ_{xz}^C および σ_{yz}^C を示す。ここで、バーガースベクトルの大きさは、 30° 部分転位におけるそれぞれらせん成分および刃状成分に等しい。なお式(3)より、 σ_{xz}^C はバーガースベクトルのらせん成分に作用する応力、 σ_{yz}^C は刃状成分に作用する応力である。

らせん転位周りの σ_{xz}^C では、転位線を境にして表面近傍で $+y$ 側に負、 $-y$ 側に正の応力分布が見られる。一方、刃状転位周りの σ_{xz}^C は、転位線を境に対称な分布を示すものの、

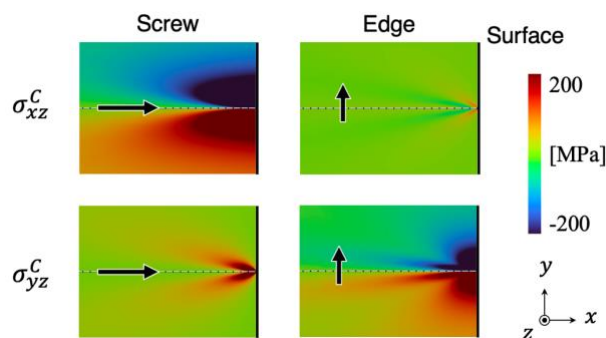


Fig. 8 Correction Stress fields σ_{yz}^C and σ_{xz}^C around a screw dislocation and an edge dislocation at an off-angle of 8° .

その応力の大きさはらせん転位に比べて小さい。このことから、 30° 部分転位によって発生する σ_{xz}^c は、バーガースベクトルのらせん成分の影響が支配的であると言える。したがって、 30° – 30° 部分転位対のらせん成分には互いに収縮する力が作用することがわかる。

さらに、らせん転位周りの σ_{yz}^c に注目すると、表面近傍において正の応力分布が形成されている。これにより、 30° – 30° 部分転位対において、バーガースベクトルの刃状成分が閉じる向きの場合には、刃状成分に収縮する力が作用し、開く向きの場合には拡張する力が作用する。一方、刃状転位周りの σ_{xz}^c では、転位線を境にして+y側に負、-y側に正の応力分布が生じている。よって、 30° – 30° 部分転位対の刃状成分の向きに関わらず、刃状成分には互いに拡張する力が作用することがわかる。

以上より、 30° – 30° 部分転位対では、バーガースベクトルが表面に対して閉じている場合の方が、開いている場合よりも収縮しやすいと考えられる。

(4) 30° – 90° 部分転位対の挙動

図8に示した修正応力の分布から、 30° – 90° 部分転位対の挙動についても予測が可能である。 30° – 90° 部分転位対においては、 90° 部分転位はバーガースベクトルのらせん成分を持たないため、 30° 部分転位のらせん成分によって生じた σ_{yz}^c の影響を 90° 部分転位のみが受けることになる。このように、 90° 部分転位のみ作用する力が存在するため、2つの部分転位の間に力の不均衡が生じ、両者が同じ方向に移動することが考えられる。したがって、 30° – 90° 部分転位対は表面近傍の鏡像力によってエピタキシャル膜内から除去される可能性がある。

5. BPD–TED変換の解析

第4章と同様に、解析モデル、弾性定数、およびバーガースベクトルの向きは同じだが、ここでは図9に示すように、表面から-x方向に5.0 nmの範囲で、完全転位への収縮が起きたと仮定した初期状態を用いた。なお、完全転位のバーガースベクトルは大きさが0.3087 nm[14]で、+y方向を向いている。

図10には、オフ角が 8° 、バーガースベクトルが表面に対して閉じている場合における5000ステップ目、15000ステップ目、25000ステップ目の転位形状の様子を示している。まず、完全転位が基底面から立ち上がり、TEDへと変換される挙動が確認できた。これは完全転位が表面からの鏡像力を受けて表面に近づこうとする力が働くためである。また、部分転位対が収縮すると同時に、TEDが表面から離れる方向へ移動する挙動が見られた。このような挙動は、オフ角が 4° から 16° の範囲では、バーガースベクトルの向きによらず見られた。このことから、部分転位対が表面近傍の鏡像力によって完全転位へと収縮した場合、TEDへの変換が容易に進行することが考えられる。

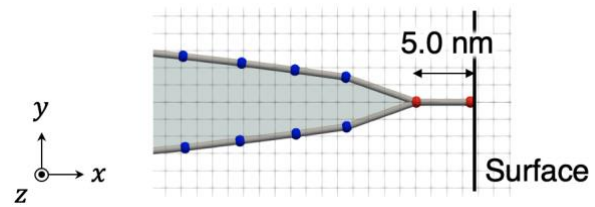


Fig. 9 Initial dislocation configuration near the surface.

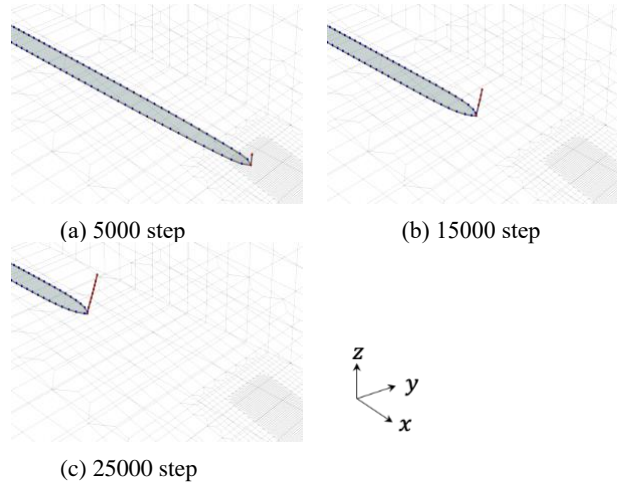


Fig. 10 BPD and TED configurations at an off-angle of 8° .

6. 結論

本研究では、転位動力学法を用いてBPDに対する表面の影響を解明した。まず、二次元転位動力学解析では、BPDの平衡距離について、表面から部分転位対までの深さごとに算出した。その結果、BPDは表面に近づくほど、強い鏡像力を受けて幅が減少する傾向が見られた。このことから、BPDは表面に近いほど完全転位へ収縮しやすいと考えられる。

次に、三次元転位動力学解析では、BPDのうちの 30° – 30° 部分転位対について、オフ角を変化させてその形状を算出した。その結果、オフ角が小さいほど部分転位対の幅が小さくなった。これはオフ角が小さいほど表面と転位との距離が小さくなり、より強い鏡像力が作用するためである。このことから、オフ角が小さいほどBPDからTEDへの変換が起きやすいことが考えられ、これは実験結果とも一致している。また、転位のバーガースベクトルの向きによって、BPDの収縮のしやすさが異なることも確認された。バーガースベクトルが表面に対して閉じる向きの場合の方が、開く場合よりも収縮が起きやすいことが明らかとなった。また、 30° – 90° 部分転位対は、鏡像力によってエピタキシャル膜内から除去される可能性がある。

最後に、 30° – 30° 部分転位対が表面近傍で完全転位へと収縮した状態を初期状態とした解析では、オフ角が 4° から 16° の範囲で、バーガースベクトルの向きに関わらず、BPDからTEDへの変換挙動が見られた。このことから、BPDが完全転位へと収縮さえすれば、TEDへの変換は自発的に進行すると考えられる。

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., Shimozaoto, 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] Myers-Ward, R., Gaskill, D. K., Stahlbush, R. S., Mahadik, N. A., Wheeler, V., Nyakiti, L. O., and Eddy, C. R., et al., Managing basal plane dislocations in SiC: Perspective and prospects, *ECS Transactions* 50.3: 103, 2013.
- [9] Chen, W., and Capano, M. A., Growth and characterization of 4H-SiC epilayers on substrates with different off-cut angles, *Journal of applied physics*, Vol.98, No.11, 2005.
- [10] 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.
- [11] 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.
- [12] 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.
- [13] 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.
- [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.