

4H-SiC中の螺旋欠陥 に関する研究

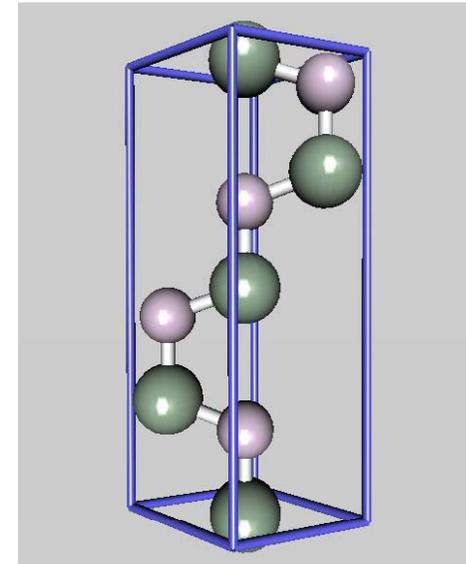
奈良純¹、山崎隆浩²、甲賀淳一郎³、
宇田毅³、黒田明義⁴、南一生⁴、大野隆央^{1,5}

¹物材機構, ²富士通, ³アスムス,

⁴理研, ⁵東大生産研

背景

SiC : 代表的な次世代半導体材料
ワイドギャップ、高耐熱性、高熱伝導性
高温、高線量下で利用できる半導体材料
(電気自動車、AC-DCコンバータ...)



4H-SiC unit cell

高品質化 => 欠陥の低減が必要
欠陥物性の理解が必要

らせん転位

- ・電子状態: ギャップ準位の性質が重要
デバイス特性に影響
- ・原子構造: 不明

転位は構造が複雑、計算量も多く、計算は殆ど皆無

計算手法

PHASE v11.00

- 東大生産研及びNIMSで開発
- 東大生産研webサイトからダウンロード可能
<http://www.ciss.iis.u-tokyo.ac.jp>

京コンピュータ

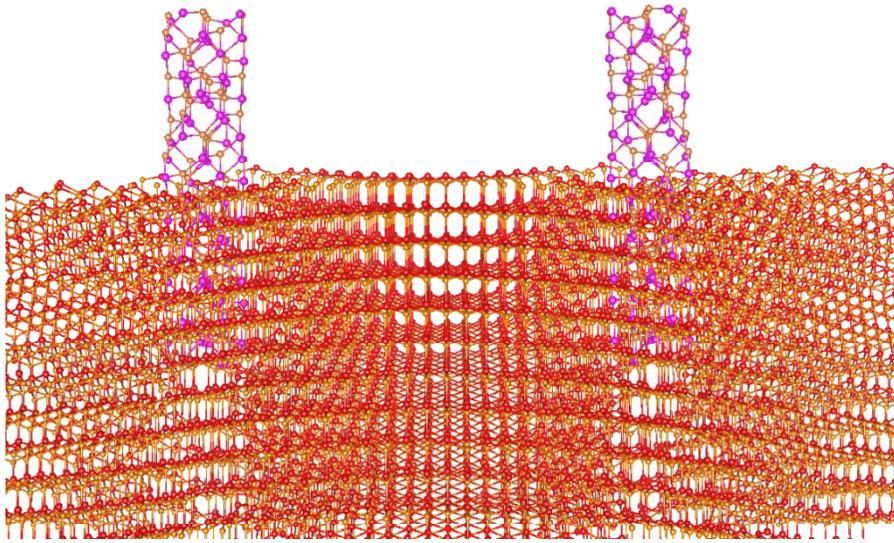
- 理研と富士通が協力して開発
- 京向けにチューンされたPHASEを使用

計算条件

- 密度汎関数法 : 交換相関項にLDA-PW91を使用
- 擬ポテンシャル法 : ウルトラソフト型、ノルム保存型
- 平面波基底 : カットオフエネルギー16 Ry
- BZ積分 : Γ 点のみ

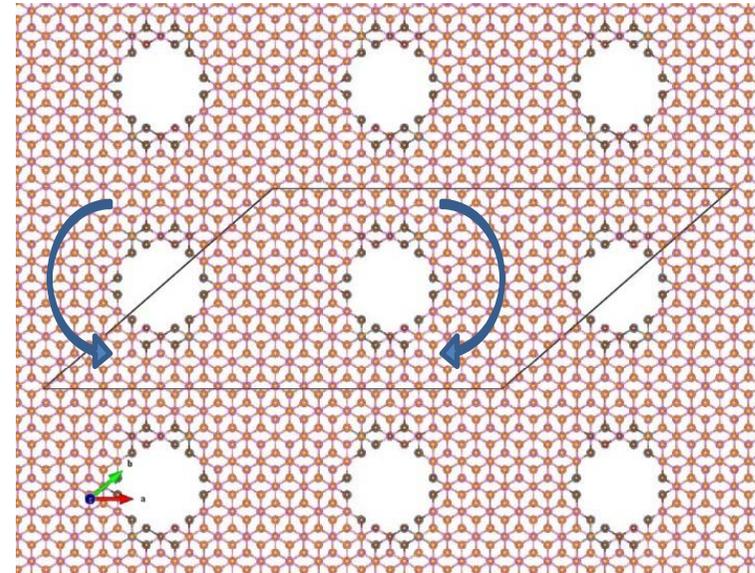
螺旋転位の構造

- コアの原子の引き抜き

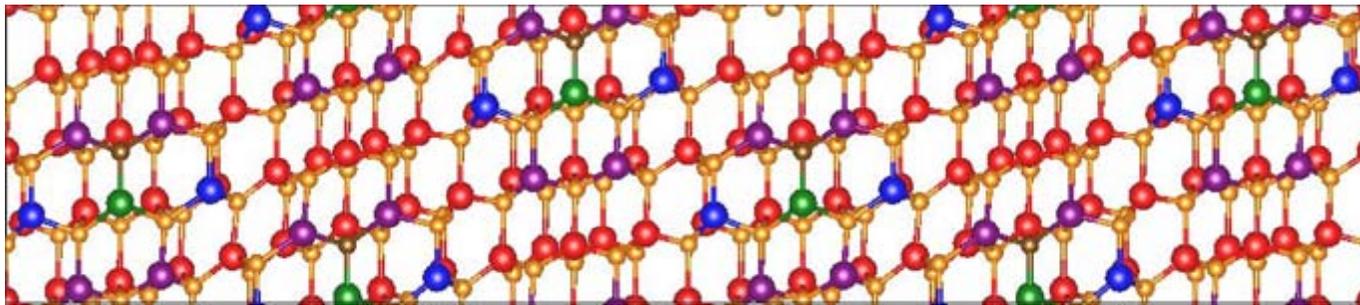


Side view

- セル中に反対向きの螺旋



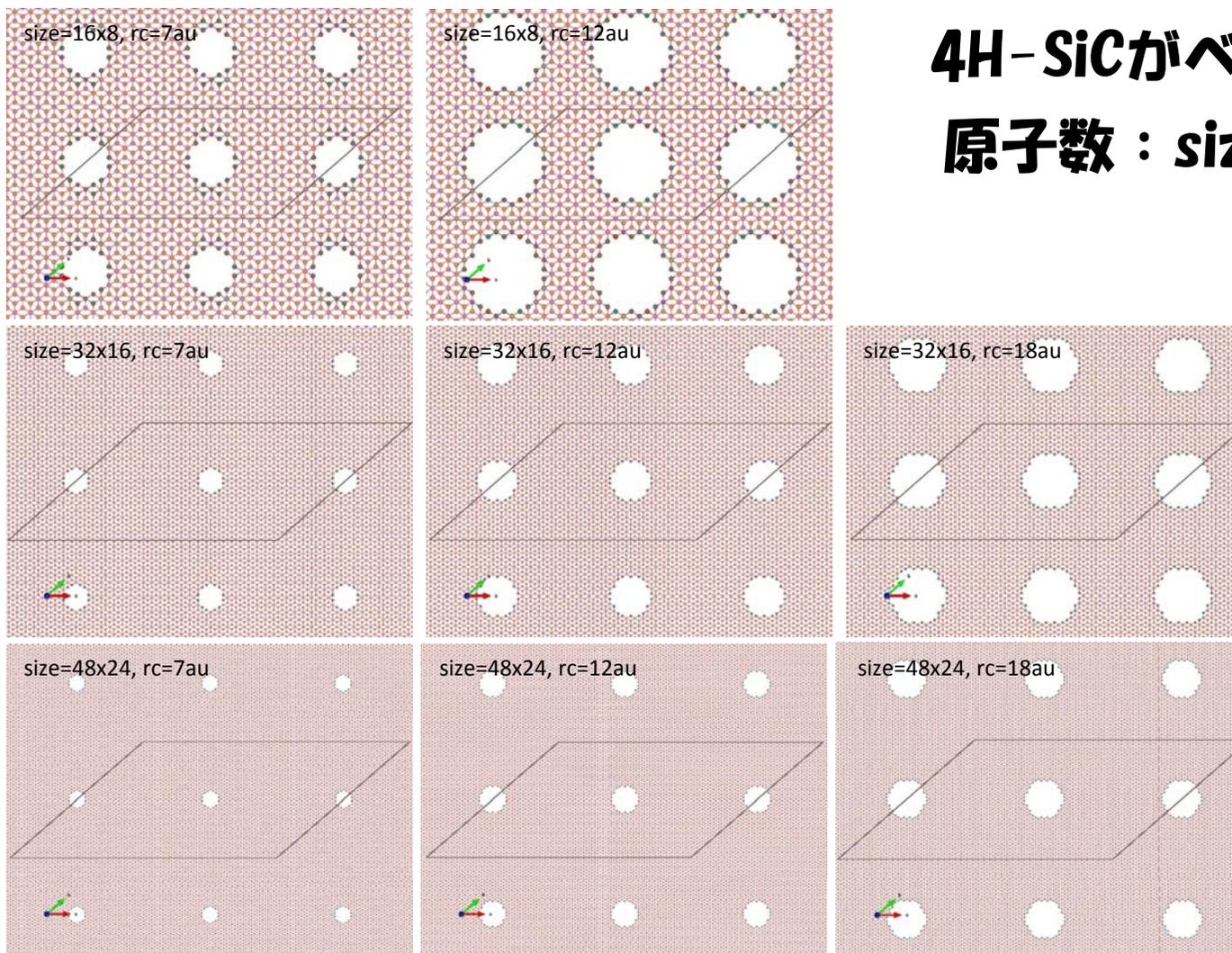
Top view



螺旋のコア内部から見た原子構造

構造モデル

Unit Cell Size



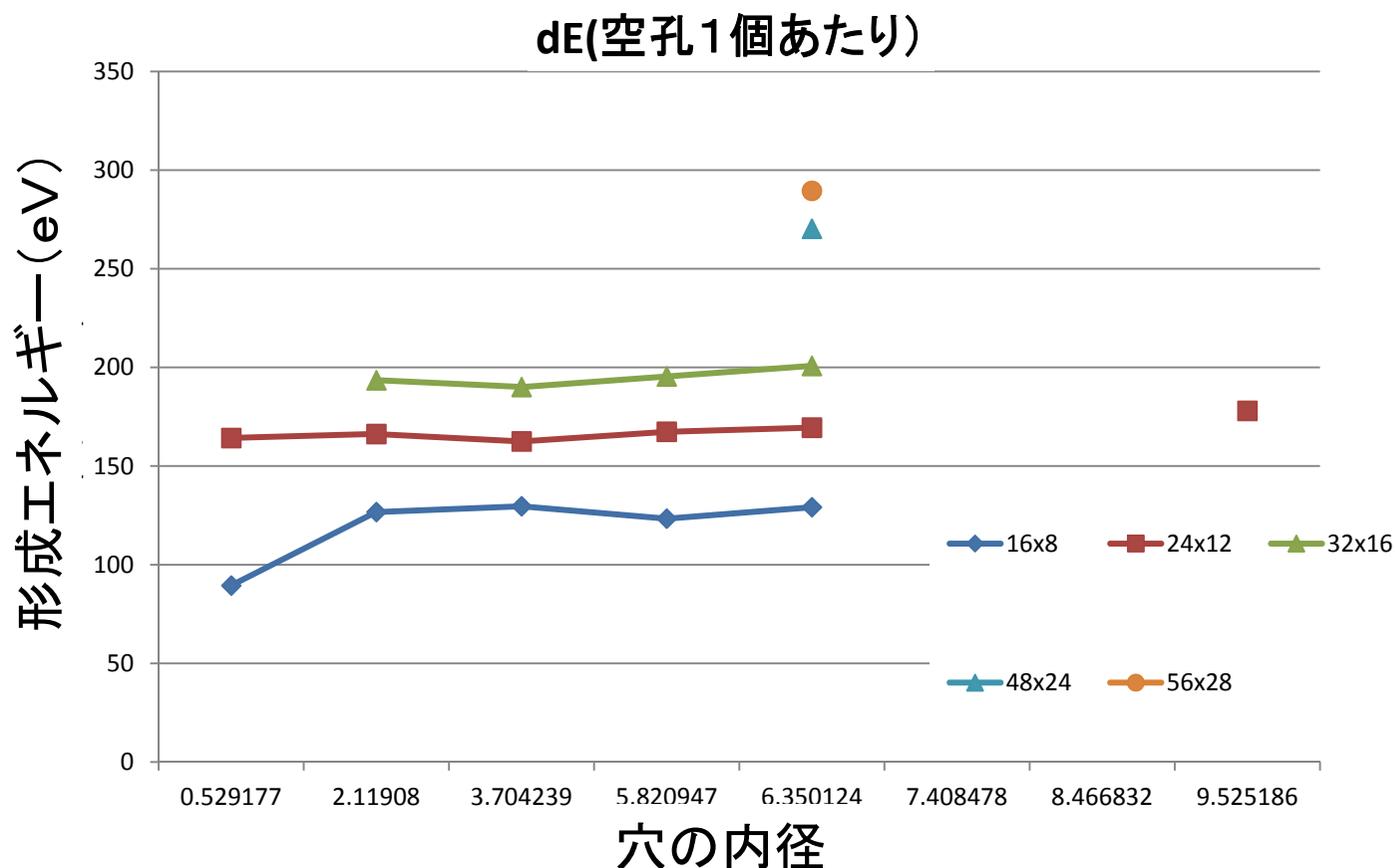
4H-SiCがベース

原子数 : $\text{size} * 8$

Screw Core Radius

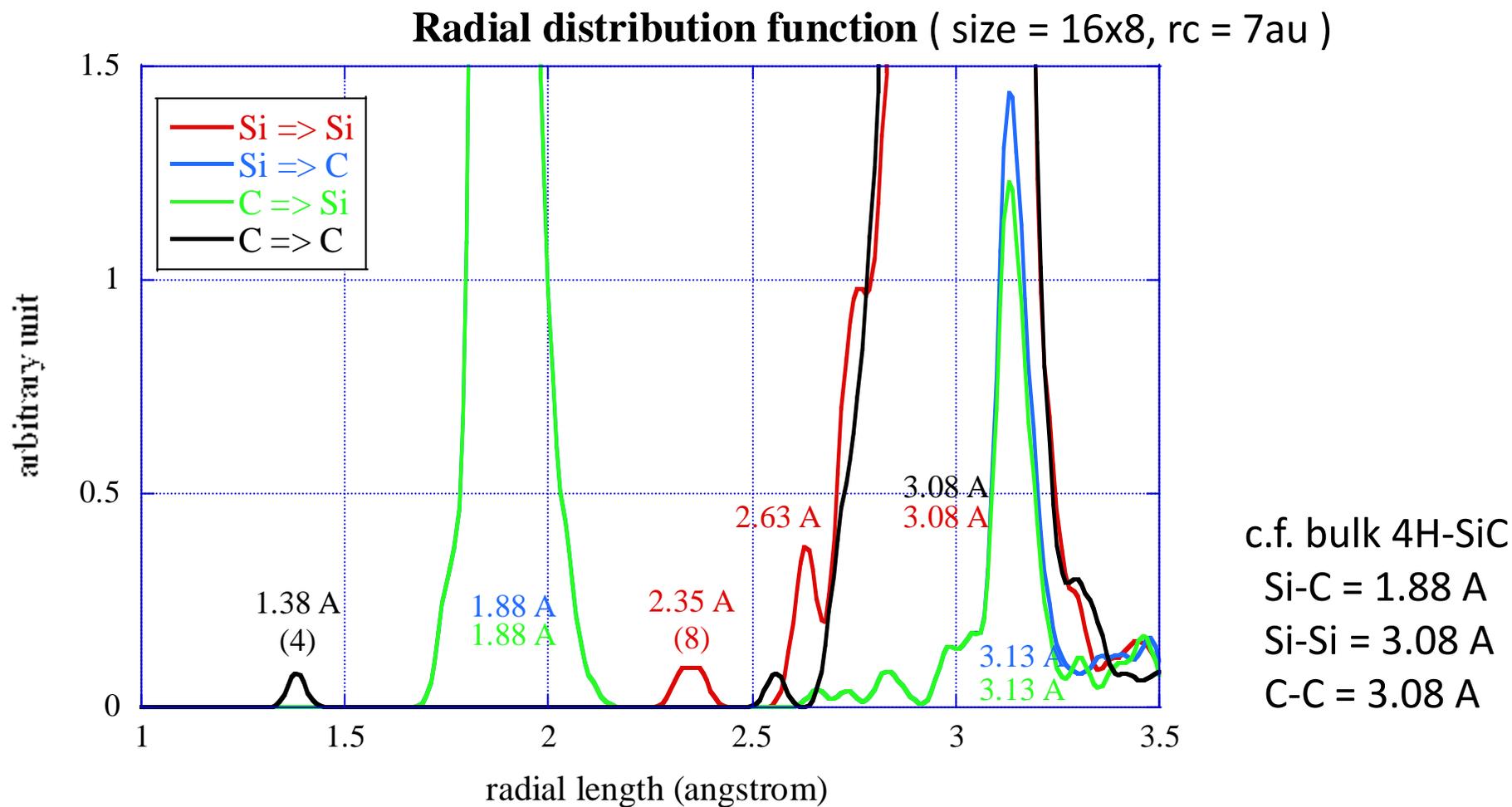


螺旋転位の安定性



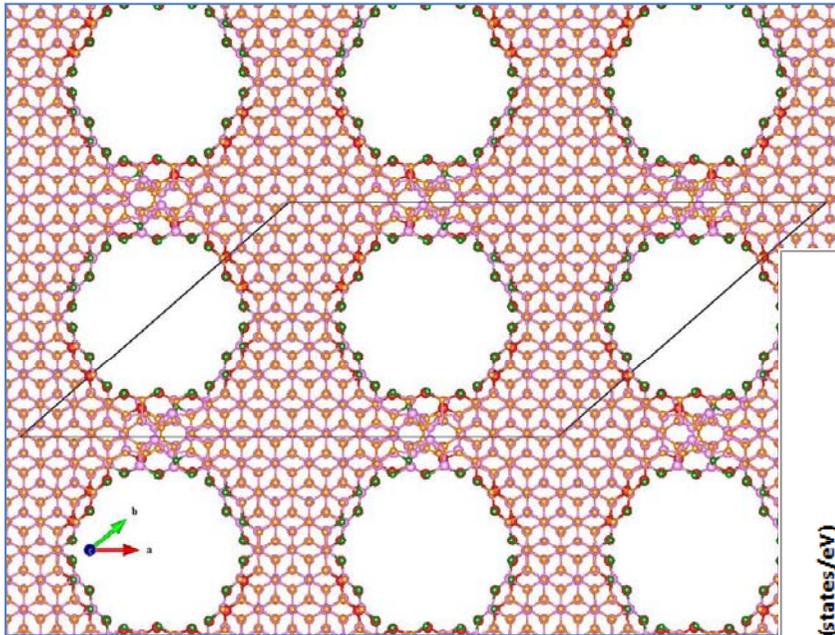
穴の内径が一番小さい場合 ($rc = 1\text{au}$) では、コア間に亀裂が入ってしまい、螺旋構造が崩れてしまった。その点を除くと形成エネルギーはコアの穴の内径に依らずほぼ一定。

螺旋転位付近の結合



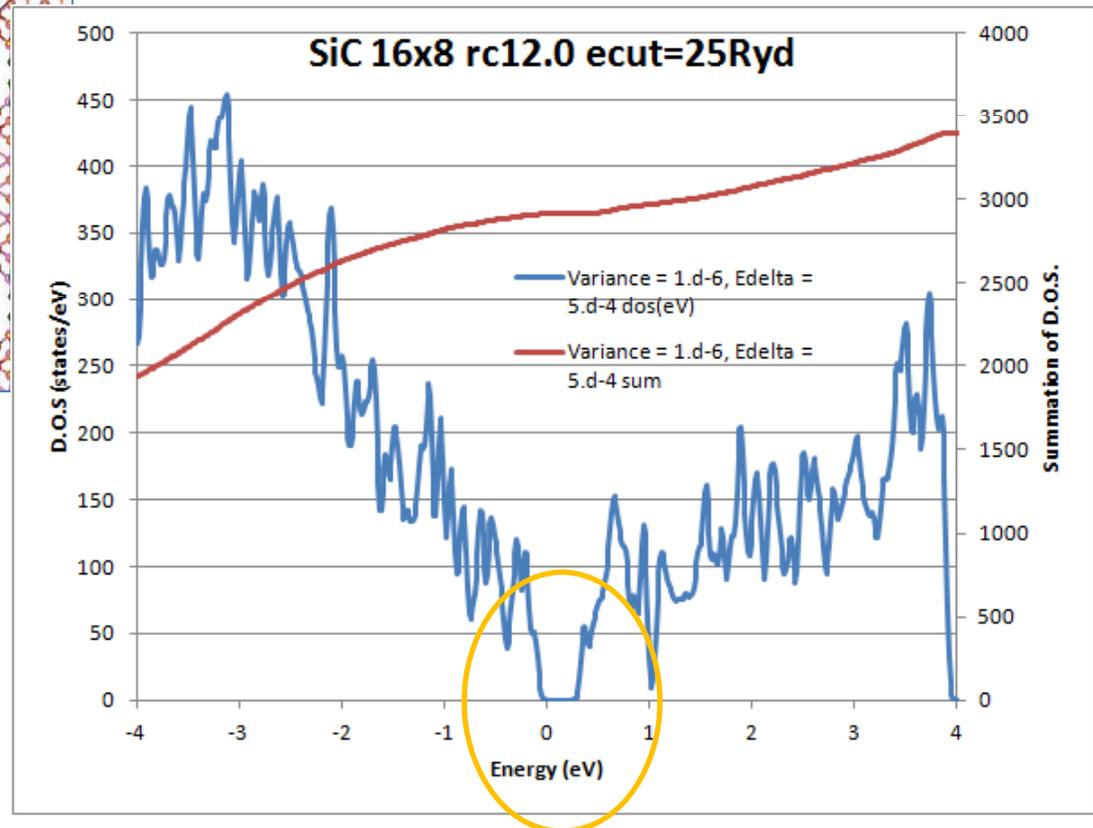
バルクSiC中には本来ないC-C結合、Si-Si結合が生じている。

螺旋転位の電子状態(DOS)

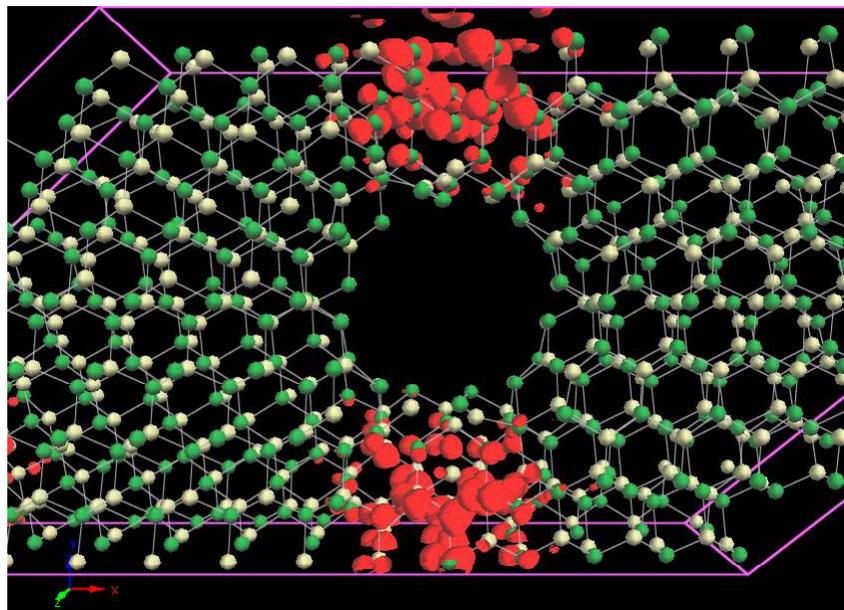


SiC 螺旋転位
 $rc=0.6$ nm
(16x8)cell

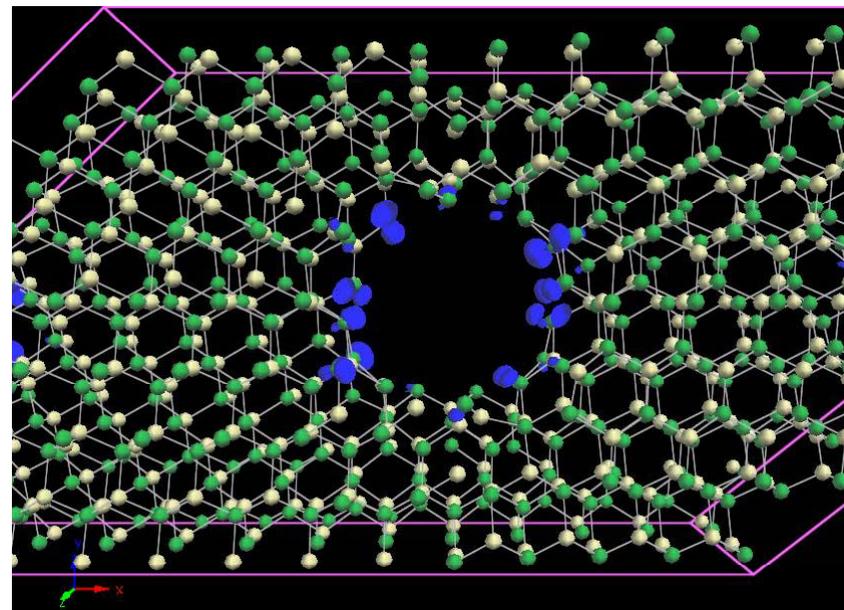
**0.5-0.6 eVのエネルギー
ギャップを持つ**



螺旋転位のHOMO-LUMO状態



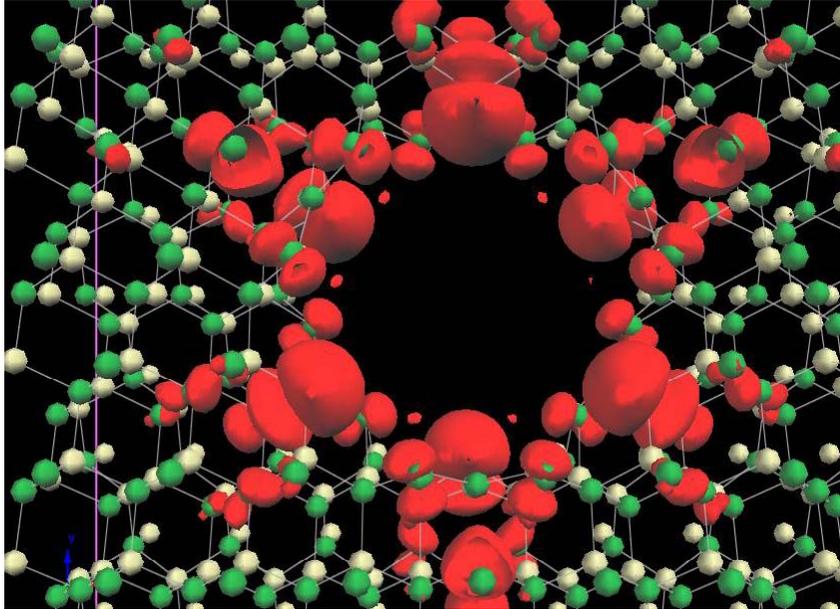
HOMO



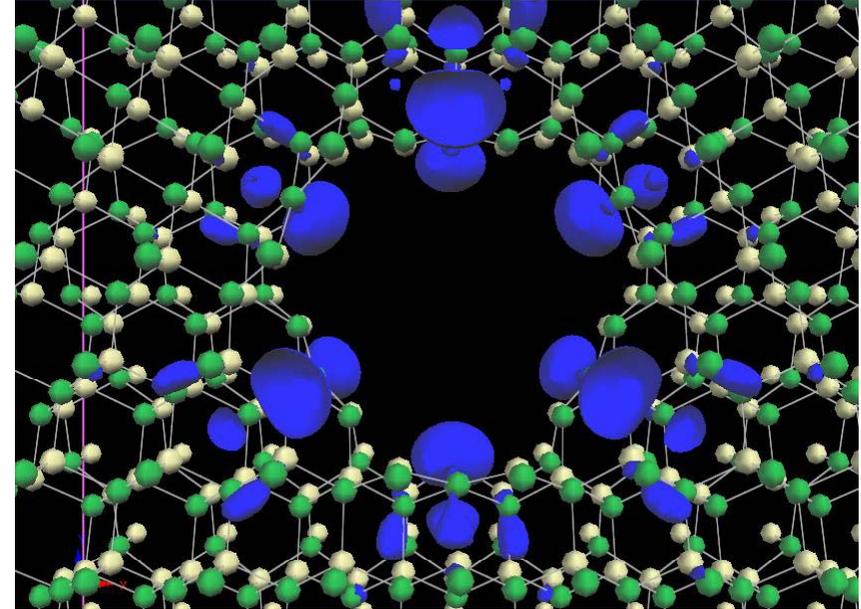
LUMO

HOMOレベルはコア間に分布、LUMOレベルはコア付近に分布
ユニットセルが小さい可能性あり。大きいユニットセルについて解析

螺旋なしの電子状態



HOMO

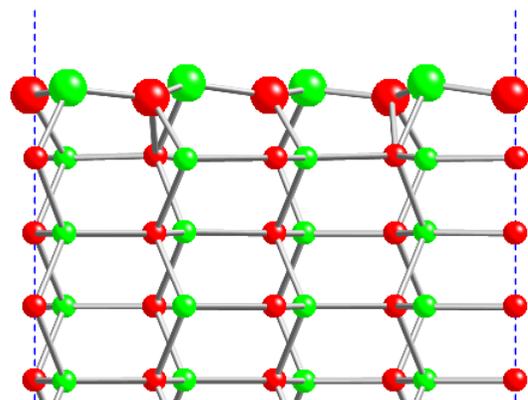


LUMO

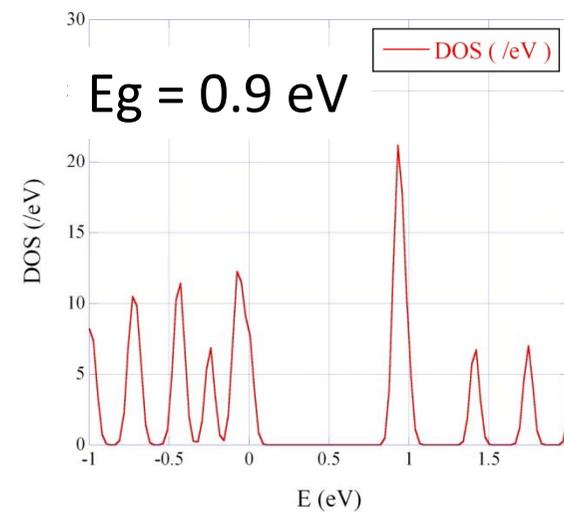
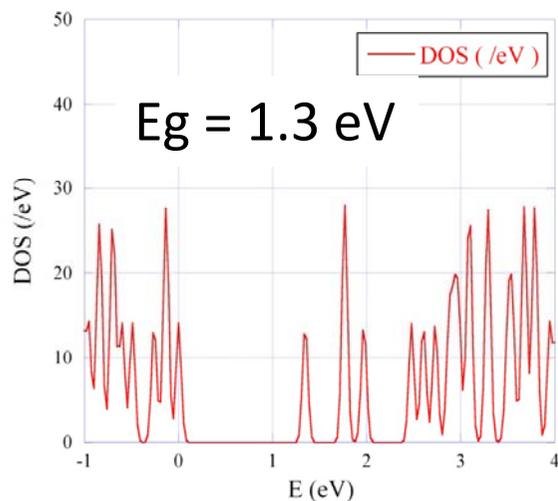
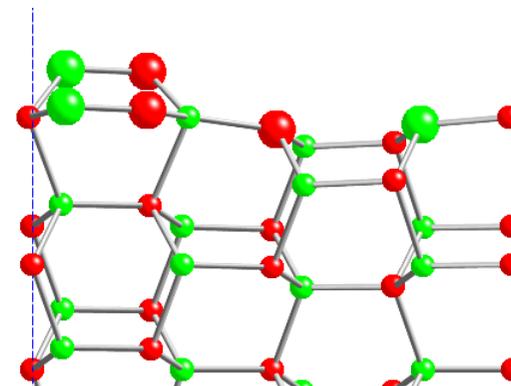
エネルギーギャップは0.9eV。
HOMO、LUMOは穴の表面に分布している。
穴の表面は(11-20)、(1-100)表面。

4H-SiC表面の構造、DOS

(11-20)



(1-100)



螺旋がない場合のエネルギーギャップは0.9eVは(1-100)表面のエネルギーギャップを反映している。

まとめ

- 4H-SiC中の螺旋転位に関して電子状態計算を行った。
- Core sizeによらず形成エネルギーはほぼ同じであった。
- Core表面に3配位以上の原子だけを配置することにより、電子的には0.5~0.6eVのエネルギーギャップが生じる。
- Coreの表面は(1-100)、(11-20)表面で出来ていると考えられる。これらの表面のエネルギーギャップは0.9~1.3eVであるため、螺旋転位のエネルギーギャップには構造の歪みが効いていると考えられる。