

## 7. 基底面転位とショックレー型積層欠陥の構造

### ・はじめに

SiC 結晶では、巨視的に見ると 1 本の基底面転位のように見えていても、微視的に見ると 2 本の基底面部分転位に分解していて、その 2 本の基底面部分転位の間にはショックレー型積層欠陥が形成されています[1-5]。SiC 結晶ではショックレー型積層欠陥のエネルギーが低いので、比較的簡単に二つの部分転位の距離が広がり積層欠陥の面積の増大が容易に発生します[1-5]。SiC バイポーラ素子で発生するいわゆる順方向特性劣化もこのショックレー型積層欠陥の面積の増大による現象と考えられています。この連載を含めて**連載 8,9,10** で、バイポーラ素子での順方向特性劣化の現象を引き起こす基底面転位と、バイポーラ素子を作製する前段階のエピ膜中に残存する基底面転位との関係を示します。この関係より、順方向特性劣化を引き起こす基底面転位が、どのプロセスにより導入されたものかを議論することが可能になると考えられます。この**連載 7** では、まず 4H-SiC 結晶の基底面に存在する基底面転位とショックレー型積層欠陥との結晶学的な関係を整理しておきます。ここで整理した内容は、後の**連載その 8,9,10** での議論で使います。

### ・ 4H 構造の基底面の積層

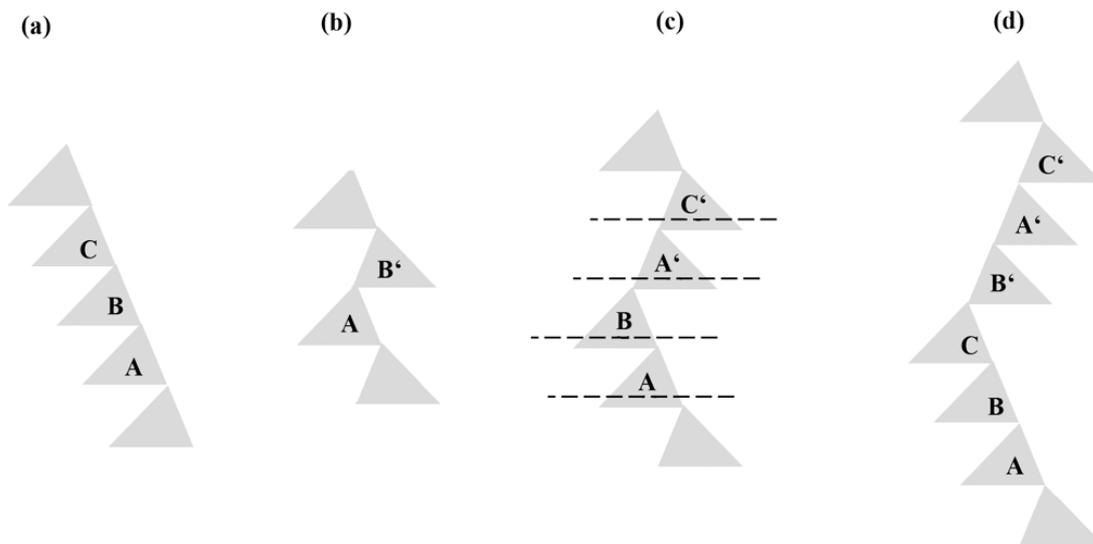


図 1 (a) 3C 構造での四面体の積層、(b) 2H 構造での四面体の積層、(c) 4H 構造での四面体の積層、(d) 6H 構造での四面体の積層を示す図。

図 1 は 3C、2H、4H、6H 構造での四面体の積層の様子を示した図です。四面体の 4 隅に C 原子、四面体中心に Si 原子を配置することとします。3C 構造では、各四面体は反転されることなくそのまま ABCABC...と積層します。2H、4H や 6H では四面体の左右が反転しているものが現れます。反転している四面体には ‘ のマークをつけてい

ます。図 1 (c)中の破線は、基底面転位やショックレー型積層欠陥が導入される位置を示しています。基底面転位やショックレー型積層欠陥は、C原子で構成された四面体の底面と、四面体の中心のSi原子層との間に導入されます。以下にそれらの基底面転位が形成する転位ループの構造を整理します。

・基底面転位ループの構造

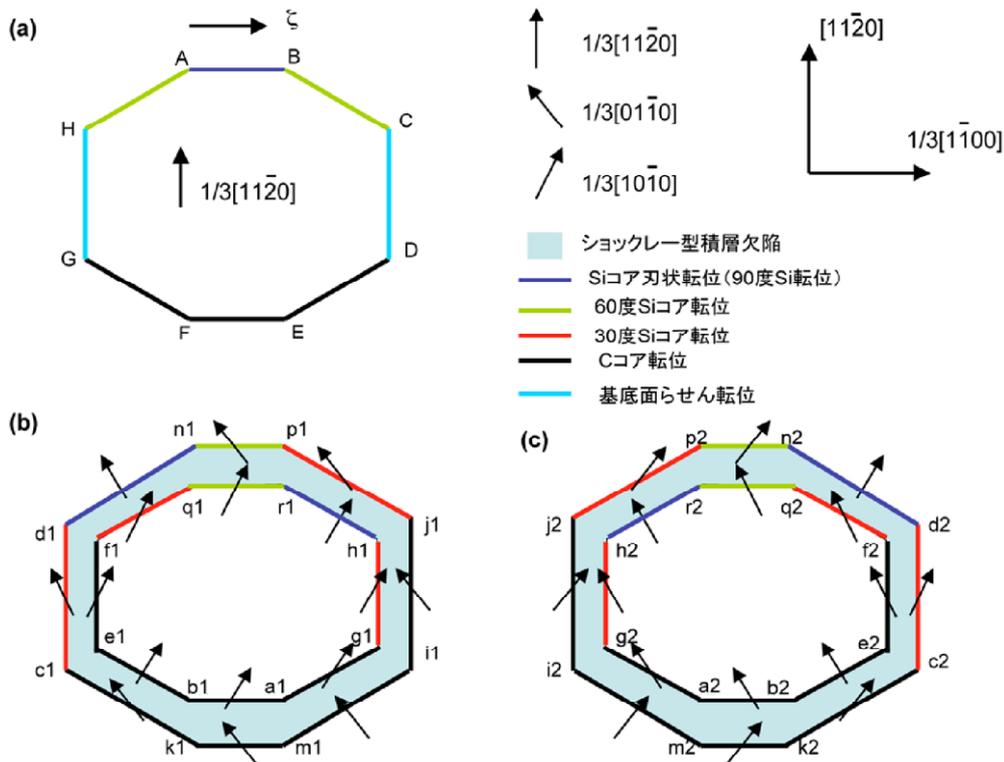


図 2  $b=1/3[11\bar{2}0]$ の基底面転位ループの構造。(a) 巨視的に見た時の完全転位状態の転位ループ。(b) 2つの部分転位に分解し、間にショックレー型積層欠陥が存在している状態の転位ループ。(c) 同じく2つの部分転位に分解した状態だが、(b)で示したものと異なる分解の状態。

図 2 は Si 面側から見た基底面転位のループの模式図を示します[5,6]。各転位の向きを時計回りに設定します。転位がバーガース・ベクトルと直交する向きに走っている部分は刃状転位と定義されます。転位がバーガース・ベクトルと平行あるいは反平行になっている部分をらせん転位と定義しています。それ以外の部分は、刃状成分とらせん成分とを合わせ持つ混合転位部です。刃状成分があると転位線に沿ってダングリングボンド列が出現します。実際の転位ではダングリングボンド自体はリコンストラクトしていると考えられていますが、ここではダングリングボンドを持つと表現して話しを進めます。一方で、らせん転位部にはダングリングボンド列はありません。図 2 (a) は  $b=1/3[11\bar{2}0]$ の完全転位の転位ループを示しています。完全転位の  $H \rightarrow A \rightarrow B \rightarrow C$  は Si 原子がダングリングボンドを持つ Si コア転位です。  $A \rightarrow B$  部はバーガース・ベクトルと転位とが直角を成しており Si コア刃状転位部です。  $H \rightarrow A$  部、  $B \rightarrow C$  部はバーガース・ベクトルと転位とが 60 度の角度をなす 60 度 Si コア転位部です。  $C \rightarrow D$  部、  $G \rightarrow H$  部は基底面転位のらせん転位部分です。  $D \rightarrow E \rightarrow F \rightarrow G$  は C コア転位です。図 2(a)は巨視的に見た基底面完全転位のループですが、この完全転位は、微視的に見ると、ショックレー型積層欠陥をはさんで2つの部

分転位に実際には分解しています。これは、通常以下ように示されています。

$$\mathbf{b}=1/3[11\bar{2}0] \rightarrow 1/3[10\bar{1}0] + 1/3[01\bar{1}0]$$

分解の仕方には2種類あり、それらを図2(b)と2(c)に示します。図2(b)では1/3[10 $\bar{1}$ 0]の部分転位がループの内側に、1/3[01 $\bar{1}$ 0]がループの外側に存在しています。図2(c)では逆転しています。また、図2(b)と2(c)は互いに左右を反転させた構造になっています。図1(c)で示されているように、4H-SiCでは四面体A、Bと四面体A'C'では左右の向きが逆になっていて、図2(b)の転位ループは、基底面転位が四面体A、Bの中のすべり面上に載っているときに現れ、図2(c)で示されている左右が逆転している転位ループは、四面体A'C'の位置で現れます。4H-SiCの[0001]方向の積層の順番に基底面転位ループを見ていくと、図2(a)の型の転位ループが2回現れて、つぎに図2(b)の型の転位ループが2回現れるということになります。以上より、 $\mathbf{b}=1/3[11\bar{2}0]$ のバーガース・ベクトルを持つ転位ループには2種類のものがあることがわかります。4H-SiCの基底面転位には6つの方向を向く6種類のものであるので、基底面転位ループには12種類の異なる構造のものがあると考えられます。2H-SiCでは、図2(a)の型のもの、図2(b)の型のもの交互に1回ずつ現れます。3C構造だと図2(a)のものかあるいは図2(b)のもの1種類のみしか現れません。

図2(a)と2(b)での黒線はCコアの部分転位部を示しており、青線はSiコア刃状転位部、緑線が60度Siコア転位部、そして赤線が30度Siコア転位部を表しています。後の連載その8で述べる順方向特性劣化やREGD効果では、赤線の30度Siコア転位部が、転位線に垂直に動き出し積層欠陥の面積を増大させる現象として報告されています[7]。図2(a)のc1→d1部では1/3[01 $\bar{1}$ 0]の部分転位転位が1/3[11 $\bar{2}$ 0]方向に向かって走り積層欠陥の左側に30度Siコア転位が位置しています。h1→g1部では1/3[10 $\bar{1}$ 0]の部分転位転位が1/3[ $\bar{1}$  $\bar{1}$ 20]方向に向かって走り積層欠陥の左側に30度Siコア転位が位置しています。図2(b)g2→h2部では1/3[01 $\bar{1}$ 0]の部分転位が1/3[11 $\bar{2}$ 0]方向に向かって走り積層欠陥の左側に30度Siコア転位が位置し、またd2→c2部では1/3[10 $\bar{1}$ 0]の部分転位が1/3[ $\bar{1}$  $\bar{1}$ 20]方向に向かって走り積層欠陥の右側に30度Siコア転位が位置しています。また、図2(a)ではf1→q1部では1/3[10 $\bar{1}$ 0]の部分転位が[2 $\bar{1}$  $\bar{1}$ 0]方向に向かって走り積層欠陥の右下側に位置していて、p1→j1部では1/3[01 $\bar{1}$ 0]の部分転位が[1 $\bar{2}$ 10]方向に向かって走り積層欠陥の右上側に30度Siコア転位が位置し、同様に図2(b)ではj2→p2部では1/3[10 $\bar{1}$ 0]の部分転位が[2 $\bar{1}$  $\bar{1}$ 0]方向に向かって走り積層欠陥の左上側に位置している。q2→f2部では1/3[01 $\bar{1}$ 0]の部分転位が[1 $\bar{2}$ 10]方向に向かって走り積層欠陥の左下側に30度Siコア転位が位置しています。

以上、基底面転位が、部分転位に分解した時に30度Siコア部分転位が、基底面転位ループのどの位置にどのように現れるかについて整理してみました。これらの整理した知識は、連載その8,9,10で利用することとします。

## 参考文献

- 1) K. Maeda, K. Suzuki, S. Fujita, M. Ichihara, and S. Hyodo, *Philos Mag.* A57, 573 (1988)
- 2) X. J. Ning and P. Pirouz; *J. Mat. Res.*, 11 (1996) 884.
- 3) X. J. Ning, N. Huvey, and P. Pirouz; *J. Am. Ceram. Soc.* 80 (1997) 1645.
- 4) M. H. Hong A. V. Samant and P. Pirouz; *Philos Mag.* 80 (2000) 919.
- 5) P. Pirouz, J. L. Demenet and M. H. Hong; *Philos Mag.* 81 (2001) 1207.
- 6) H. Matsuhata, H. Yamaguchi, T. Yamashita, T. Tanaka, B. Chen, T. Sekiguchi; *Philos. Mag.* 94 (2014) 1674.
- 7) A. Galeckas, J. Linnros, P. Pirouz; *Phys. Rev. Lett.*, 96 (2006) 025502