

立方晶炭化珪素中の不純物格子欠陥における  
XPS 束縛エネルギーの第一原理的研究

2019 年度

松島 直輝

報告番号	甲 乙 第	号	氏 名	松島 直輝
主論文題名： 立方晶炭化珪素中の不純物格子欠陥における XPS 束縛エネルギーの第一原理的研究				
(内容の要旨) 低消費電力、高耐圧デバイス用基板として注目される炭化珪素(SiC)では性能劣化を引き起こすドーパント不純物格子欠陥が問題となっているが、その基本的な原子構造、特性については理解が進んでいないのが現状である。一方で、物質中の欠陥構造を調べる実験手法として、近年、シリコン結晶について高輝度放射光施設を利用した高解像度の X 線光電子分光(XPS)実験が行われている。本研究では立方晶 SiC 中の不純物格子欠陥の内殻 XPS 束縛エネルギーシフトと形成エネルギーを、一般化勾配近似 (GGA) PBE96 を用いた第一原理計算により求め、欠陥構造との関連について調べた。p 型不純物としてホウ素とアルミニウムを、n 型としては窒素とリンを取り扱い、電氣的に安定に存在しうる荷電状態についても検討した。格子欠陥系の計算では、物理量がセルサイズに依存することが知られており、この研究では 1728 原子セルを用いた計算を行った。加えて、バンドギャップ再現性の良い HSE06 混成汎関数のプログラムコードを自ら実装し、バンドギャップを過小評価する PBE96 による XPS 計算の信頼性を評価した。 XPS 束縛エネルギーを光電子放出原子近傍の局所ポテンシャルと緩和エネルギーからの寄与に分離し、個々に解析した。ポテンシャルは直感的な静電ポテンシャル描像を良く説明し、緩和エネルギーは欠陥周囲の局在電子軌道の影響を大きく受けることを明らかにした。この局在軌道は光電子放出前後いずれか、または両方において母結晶のエネルギーバンド領域外に存在することが重要である。特に、バンドギャップ以外にも、価電子帯内部に存在するエネルギーギャップ領域に生じる状態が緩和に大きく影響することが化合物半導体 SiC の特徴となっている。 本論文の構成は以下のようにになっている。第一章では研究背景として SiC と XPS について概説し、研究目的について述べる。第二章では本研究の基礎となる理論、計算方法について紹介し、第三章では計算条件とモデルについて述べる。第四章では XPS 束縛エネルギーについて議論を行い、第五章は形成エネルギーの計算結果に基づき、観測されうる XPS スペクトルピークについて議論する。最後の第六章で本論文の結論についてまとめる。				

# Thesis Abstract

No. \_\_\_\_\_

Registration Number	<input checked="" type="checkbox"/> "KOU" <input type="checkbox"/> "OTSU" No. _____ use only	*Office	Name	Naoki Matsushima
Thesis Title				
First Principles Study on XPS Binding Energies of Impurity Defects in Cubic Silicon Carbide				
Thesis Summary				
<p>Silicon carbide (SiC) is an attractive material as a substrate for energy saving and high voltage devices. Although SiC has impurity defects which degrade the performance of devices, the atomic structure of the defects are still unclear. Recently, X-ray photoelectron spectroscopy (XPS) measurements for defect structures in silicon at a large synchrotron radiation facility have been reported. In this study, the formation energies and core level XPS binding energy shifts of boron and aluminum as <i>p</i>-type, and nitrogen and phosphorous as <i>n</i>-type impurity in cubic SiC were obtained by means of first principles calculation with generalized gradient approximation (GGA) PBE96. The relationship between XPS binding energies and defect structures including charge states were investigated. It is known that calculated values depend on the cell size seriously in defect system. Therefore, I adopted 1728-atom supercell. In addition, I implemented the code of HSE06 hybrid functional, which reproduces bandgap much better than PBE96, and confirmed the reliability of the results using PBE96.</p> <p>XPS binding energies were separated into the contributions from the local potential around the atom from which a photoelectron is emitted and relaxation energies, and analyzed individually. It was found that the local potential analysis supports the intuitive interpretation using electrostatic potentials and the relaxation energy is largely affected by localized orbitals near the defects. It is important that this localized orbital exists outside the energy band of matrix crystal either or both before and after core electron emission. It is the characteristic feature of SiC that, in addition to the bandgap, the energy gap region exists in the valence band, where some of defects have localized states.</p> <p>In Chapter 1, I introduce SiC and XPS as the background of this study and describe the purpose of this work. In Chapter 2, the theories and methods of calculations are explained. In Chapter 3, the calculation conditions and models are introduced. In Chapters 4, XPS binding energies of the impurity defects in SiC are described in detail. In Chapter 5, the observable XPS spectra are discussed on the basis of the formation energies. In chapter 6, I summarize this work.</p>				