

# 21pTD-3

## 準安定溶媒法(MSE)における炭素濃度変化のシミュレーション

関学大院 理工 坂本 憲 西谷 滋人 金子 忠昭

Kinetic Simulation of Metastable Solvent Epitaxy

Kwansei Gakuin University, A. Sakamoto, S. R. Nishitani and T. Kaneko.

### <目的>

昇華法による現行のSiC単結晶生成プロセスは、時間、コストがかかり量産には適さない。著者らはSiC単結晶を液相から直接生成するプロセスを開発した。この準安定溶媒エピタキシー(MSE)と呼ばれるプロセスによってSiCを安価に製造することが可能となりつつある。本研究ではMSEにおける炭素濃度プロファイルの原子レベルでのコンピュータシミュレーションによる視覚化を行った。

### <原子レベルでの成長機構>

図1に4H-SiCと3C-SiCの準安定平衡状態図を示した。a点とb点は3C、4Hそれぞれの準安定、安定溶解度を示している。溶質原子を放出するか吸着するかは固液界面での炭素濃度が状態図から定まる溶解度よりも小さいか大きいかに依存している。この結果として溶媒中に図2下段パネルに示した炭素濃度勾配が生じる。これが駆動力となりプロセスは進行する。図2上段パネルに原子レベルでの結晶の成長機構を示した。まず原料板で溶質原子が「放出」され、溶媒中で「拡散」し、基板側で「吸着」が起こり、SiC単結晶のエピタキシャル成長が進む。これらがMSEにおける素過程である。

### <原子レベルでのシミュレーション>

本研究では溶媒には格子モデルを採用し、そこでの拡散は原子位置交換によると仮定した。基板、原料板を全て炭素とみなし、溶媒を挟み込む形で界面での素過程を組み込んだ。素過程の頻度、溶媒原子数を変化させ、溶媒中の炭素濃度プロファイルの時間発展をシミュレーションした。

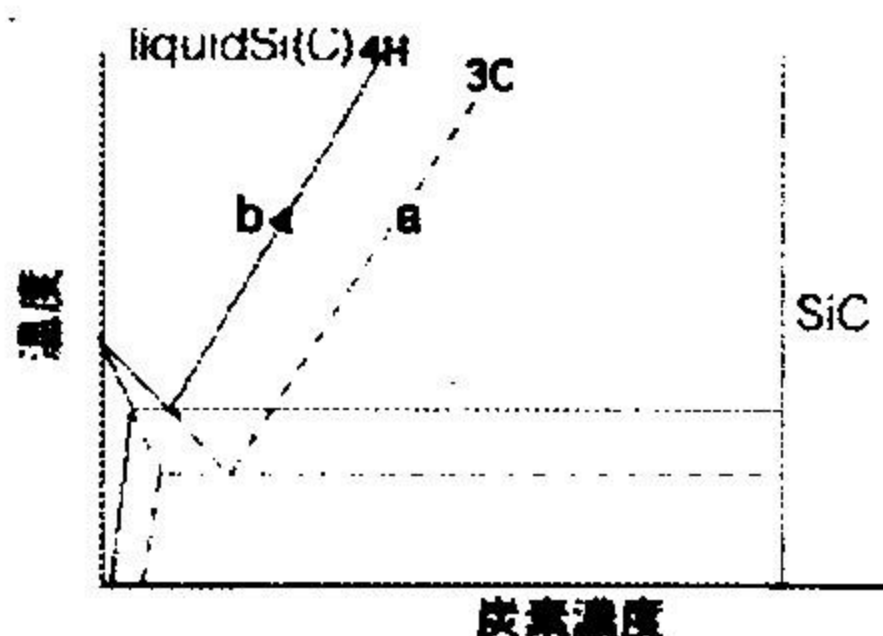


図1 準安定平衡状態図。

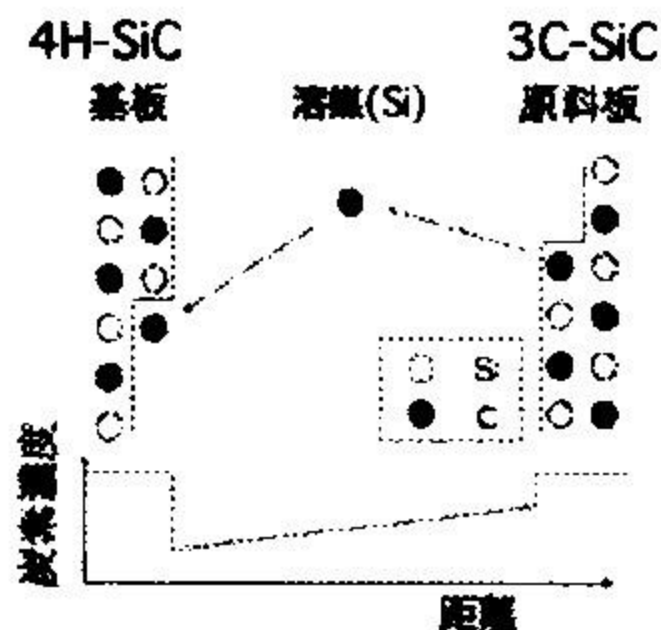


図2 原子レベルでの成長機構。