

SiC表面拡散の第一原理計算

関西学院大院 理工 山本洋佑, 寺井健太, 西谷滋人, 金子忠昭, 大谷昇
Surface diffusion of SiC by the first principles calculation,
Kwansei Gakuin Univ., Y. Yamamoto, K. Terai, S. R. Nishitani and T. Kaneko,
N. Ohtani

【背景】現在SiCのバルク成長には気相成長法が主に使用されており、原理的に低欠陥な結晶作成が可能な液相成長法の開発は困難と考えられてきた。ところが、温度勾配を結晶成長の駆動力とするのではなく、結晶表面のエネルギー差を駆動力とし、高品質のSiCの単結晶を生成する成長手法が、著者らによって開発された。これは準安定溶媒エピタキシー(Metastable Solvent Epitaxy)と呼ばれており、4H-SiCを基板、3C-SiCを原料板として使用し、その間に溶媒として液体Siの薄膜を挟み込んだ構成をとる。

【目的】MSEは未だ成長機構に不明な点が多く、表面が原子レベルでどのような構造をとるかは定かではない。そこで結晶成長の素過程である「放出」「拡散」「吸着」のうち「拡散」に着目し、4H-SiCの成長面である(0001)面において、C原子はどのような経路を辿るかを第一原理計算により検討を行った。

【手法】実験は固液界面での反応であるが、計算は真空との界面を想定した。図1のようにSi面、及びSi修飾したC面で特徴的な3点を取り、C原子を付着させたモデルを作成した。第一原理計算は表面は固定したまま、付着させたC原子の位置を縦方向に振り、安定位置を求めた。これらの値からそれぞれの表面拡散経路の活性化エネルギーを求めた。

【結果】図2はSi面およびSi修飾したC面において、C原子が拡散する際のエネルギーの模式図である。図から明らかのように、C原子は2→1→2→1のように3を通らずに、拡散すると予想される。またSi面側およびC面側ともにこの拡散経路における活性化エネルギーは小さく、高速度に拡散する事が期待される。特に、C面側ではエネルギーバリアがほとんどなく、さらに等価な拡散経路が多数存在するため、表面に付着した原子は即座にキンクサイトに運ばれると予想できる。

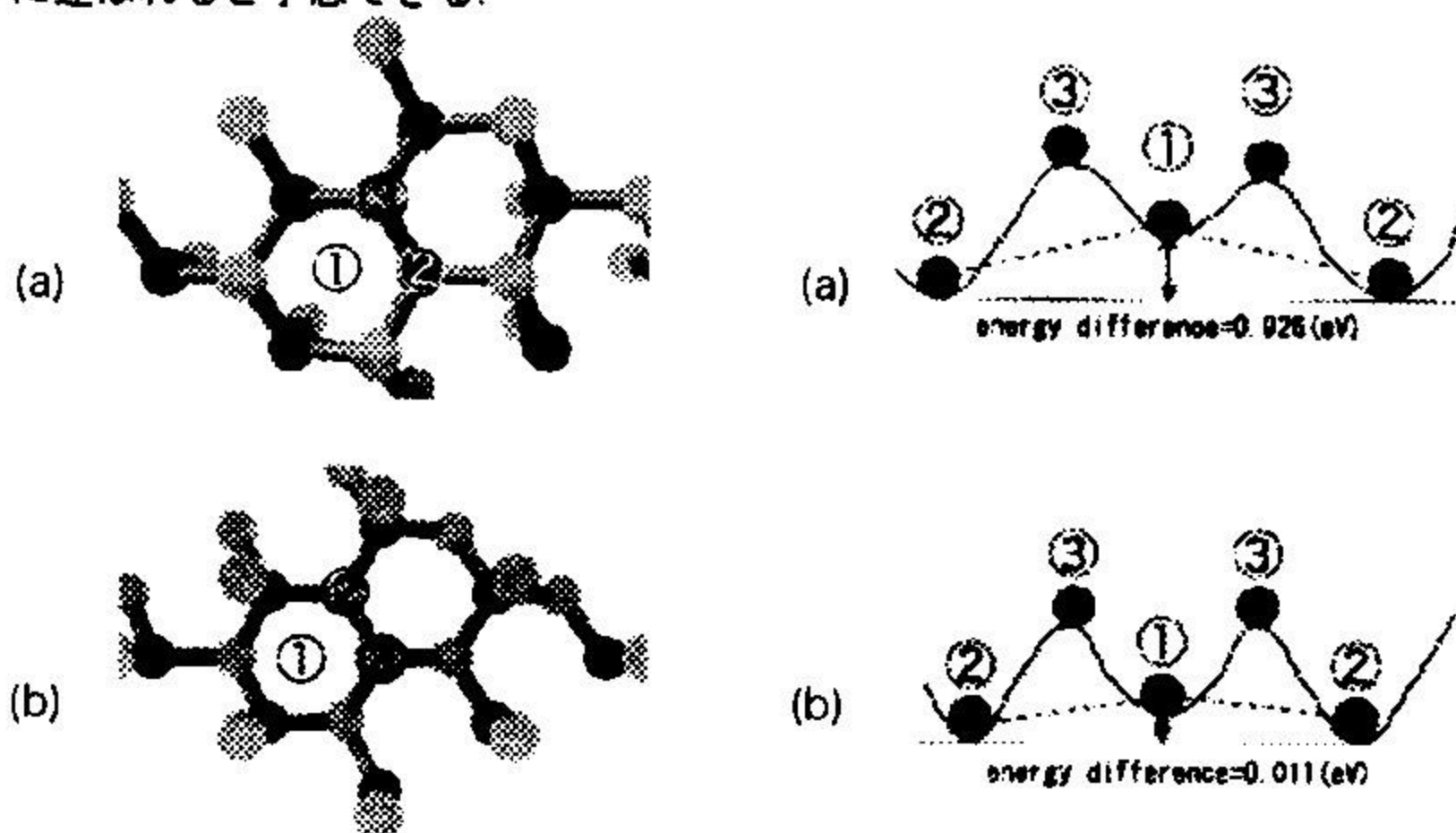


図1 (a)Si面, (b)C面でのC原子吸着位置.
白球がSi原子, 黒球がC原子.

図2 (a)Si面, (b)C面でのC原子の
活性化エネルギーの模式図.