

準安定溶媒エピタキシー(MSE)法によるSiCの結晶成長

関西学院大・理工 ○西谷滋人, 戸賀瀬健介(院生), 金子忠昭, 東北大金研 徳本有紀, 米永一郎

【背景】SiCはSiに比べてバンドギャップが大きいことから高い絶縁耐性が期待でき、高効率のパワー半導体として注目されている。最近関西学院大学の金子らによって開発された準安定溶媒エピタキシー法(Metastable solvent epitaxy:MSE)の駆動力は、準安定な3C-SiCと安定な4H-SiCとのエネルギー差であると考えられる。この成長原理は金属溶媒を用いた人工ダイヤモンドの製造法と同じである。また、MSE法は従来の気相法に比べて結晶性のいい成長法である。本研究では、このような新奇な結晶成長について第一原理計算から得られた知見を報告する。

【計算手法】第一原理計算には平面波基底擬ポテンシャル法のVASPを用いた。有限温度での多形の相安定性を求めるために、phonon分散を用いた擬調和振動子近似を、また、表面エネルギーの計算には、化学ポテンシャルの違いを考慮した。

【結果】精度の高い第一原理計算の結果によると、高温で4H-SiCが最安定となることが期待され、実験結果と一致している。SiCの典型的な成長欠陥であるマイクロパイプ生成を説明するFrankの理論[1]では、液体との界面エネルギーは真空に対する表面エネルギーよりも圧倒的に小さいため、より大きなマイクロパイプの生成が予測され、実験結果と矛盾する。そこで、他の支配機構として界面エネルギーの環境依存性によって説明可能なモデルを提案する。

[1] F.C.Frank, Acta Cryst., 4(1951), 497.