

SiCマイクロパイプ生成の環境依存性

関西学院大・理工 ○戸賀瀬健介（院生），西谷滋人，金子忠昭

【緒言】気相成長法（Lely-method）で成長させたSiC単結晶の{0001}面上には大きなマイクロパイプ欠陥が確認されている¹⁾。一方、著者らが開発した新奇なSiC単結晶成長法である準安定溶媒エピタキシー²⁾（MSE: Metastable Solvent Epitaxy）によって成長させたSiC単結晶の{0001}面は、欠陥なく成長している。本研究では、第一原理計算によりSiCの表面エネルギーを計算し、その結果から極性面の成長機構の環境依存性について考察した。

【手法】本研究では、VASPを用いて、SiCの極性面、およびそれに直交する{11-20}, {1-100}面の表面エネルギーを計算した。極性面の環境を区別するため、表面をC原子、およびSi原子で覆ったスラブモデルを作成し、Si-rich, C-richにおける各表面エネルギーを計算した。

【結果】Si-richでは、極性面の表面エネルギーが約2.86[J/m²]となり、他の面に比べ最安定な面となった。C-richでは、極性面の表面エネルギーが約7.84[J/m²]となり、最も不安定な面となった。Si-richでは極性面が最安定なため、図1(a)に示すように、マイクロパイプ欠陥が発生しても、拡散原子が欠陥に蓋をする形で固着し、平坦に成長すると考えられる。

一方、C-richにおいては、マイクロパイプの側面が安定なため、図1(b)に示すように、拡散原子は欠陥を埋めず、マイクロパイプがそのまま残ってしまうと考えられる。

[Ref] 1) N. Ohtani, M. Katsuno, T. Fujimoto, and H. Yashiro, Silicon Carbide Recent Major Advances, Springer-Verlag Berlin 2004, pp.137-162.

2) S.R. Nishitani and T. Kaneko, J. Cryst. Growth, vol. 310/7-9 (2008), pp.1815-1818.

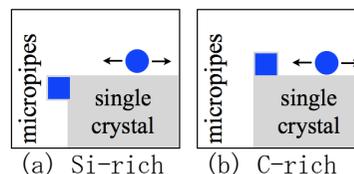


図1. マイクロパイプ周辺での原子の安定位置の模式図。