

化合物半導体のマイクロパイプ生成と表面エネルギー

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

【背景】化合物半導体の結晶成長時に生成する欠陥の代表例としてマイクロパイプがある。これは化合物半導体によくある長周期構造のために転位のバーガーズベクトルが大きくなり、転位の歪みエネルギーと表面エネルギーとの損得によって超転位の周りが欠損するとされている。この Frank の理論的予測[1]に、長周期構造を示す SiC の物性データを入れて求めたマイクロパイプの半径は10Å以下となり、期待されるよりも極めて小さい。さらに、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、大きなマイクロパイプの生成を期待させる。しかし、実験結果では、気相成長においては大きなマイクロパイプが観察されるが、液相エピタキシャル成長においては逆にマイクロパイプが閉塞する傾向が観測されている。したがって、他の支配機構があると予測される。

【表面エネルギーの第一原理計算】化合物半導体では、平衡する雰囲気によって化学ポテンシャルが変わる。4H-SiCにおいて第一原理計算を用い、この化学ポテンシャルの差を取り入れて求めた極性界面(0001)面の表面エネルギーは、C-rich側で7.6J/m²、一方Si-rich側で2.8J/m²である。これに直交する面のエネルギー3.5-4.5J/m²に比べて、C-rich側では不安定、Si-rich側では安定となる。この結果は、液相のSiと共存する雰囲気中で成長させた結晶において(0001)面が大きく、マイクロパイプが閉塞するように成長していく事実を説明している。

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