

## SiC中のマイクロパイプ生成の環境依存性

関西学院大学 大坪秀礎, 戸賀瀬健介, 山本洋佑, 西谷滋人

Environmental dependency of the micropipe formation in SiC

Kwansei Gakuin University, H. Otubo, K. Togase, Y. Yosuke, S. R. Nishitani

【目的】気相成長法(Lely-method)で成長させたSiC単結晶の{111}面上に発生するマイクロパイプはリーク電流のソースとして問題となっている。一方、準安定溶媒エピタキシー(MSE: Metastable Solvent Epitaxy)によって成長させたSiC単結晶の{111}面は、欠陥なく成長している。両手法には成長環境に大きな違いがあり、Lely法ではC-rich, MSEではSi-rich環境である。戸賀瀬らが行った研究では極性面である{111}面と、非極性面である{110}, {11-2}面のSiC表面エネルギーを計算をした。結果、C-richにおいて極性面が他の面に比べ不安定、Si-richにおいては、極性面が最安定となった。Si-richでは極性面が最も安定なため、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、拡散原子は欠陥を埋めず、マイクロパイプがそのまま残ると考えられる。しかしその計算では、表面エネルギーを求める際に内部緩和を行っていなかった。本研究では、SiCにおいて、内部緩和させた表面エネルギーを計算し、その結果からマイクロパイプの生成機構を検討した。

【方法】表面エネルギーを計算するにあたって、いくつかのSiC多形を対象とした。原子モデル計算ソフトMedeAを用いて、SiCのバルクモデルと、対象となる面のスラブモデルの作成した。表面付近の原子のみを内部緩和させ、計算を行った。第一原理計算は平面波基底擬ポテンシャル法であるVASPを用いて、その値から単位面積あたりの表面エネルギーを求めた。

【結果】小さなサイズのモデルによる計算結果を表1にまとめた。3C-SiCの{11-2}, {110}面において原子位置を固定した結果(fix)と内部緩和させた結果(relax)の表面エネルギーである。{110}, {11-2}面では非極性面のため、Si-rich, C-richの区別がない。表1で示すように、fixとrelaxでの表面エネルギー $E_s$ の値に差はそれほど大きくなかった。発表では極性面の結果も報告する。

表1 3C-SiCのfixとrelaxにおける表面エネルギー。

		fix	relax
		$E_s$ [J/m <sup>2</sup> ]	
{111}	Si-rich	2.80	-
	C-rich	7.60	-
{110}		3.53	2.90
{11-2}		4.45	4.08