

1 具体的な適用例

1.1 SiC 表面エネルギー計算

1.1.1 背景

SiC は現在、半導体材料として主に用いられている Si に比べ、高耐圧、低損失等の優れた物性的特徴から次世代パワー半導体材料として注目されている。しかし、実用化が遅れている原因として、SiC の単結晶成長が困難であり、単結晶に多くの欠陥を生む事が挙げられる。

SiC 単結晶成長には、主に Lely 法と呼ばれる気相成長法が用いられている。これは原料の 3C-SiC を気化させ、C 坩堝から大量の C が溶けている不活性ガスを介し、種結晶の 4H-SiC へ運び、結晶を成長させる。この成長環境は C の濃度が高く C-rich である。この環境で成長させた SiC 単結晶には、マイクロパイプ欠陥が (0001) 面上に確認されており、その様相を図 1 に示した。

一方、関西学院大学・金子教授らが MSE 法と呼ばれる液相成長法を開発した。これは原料の 3C-SiC から溶け出した Si 原子と C 原子を液体 Si を介して、種結晶の 4H-SiC へ運び、結晶を成長させる。この成長環境は液体 Si に囲まれている為、Si-rich である。この環境で成長させた SiC 単結晶には、マイクロパイプ欠陥は見られず、低欠陥で高品質な単結晶成長を実現している。

SiC を単結晶成長させると、どのように成長し、マイクロパイプ欠陥の有無に関係しているのかを調べる為、相対的な結果となった両手法をモデルにした。本節では、VASP を用いた第一原理計算によるアプローチを紹介する。

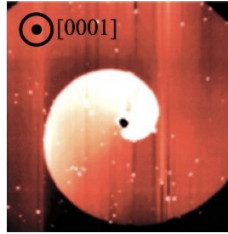


図 1: Lely 法により (0001) 面上に発生したマイクロパイプ欠陥

1.1.2 手法

1. 原子モデル構築ソフトである MedeA を使用し、SiC 多形の内、3C, 4H, 6H のバルクモデルとスラブモデルを作成する。
2. VASP を用いて、両モデルのエネルギー $E_{i(\text{bulk})}$ と $E_{\text{SiC}(\text{slab})}$ を計算する。
3. モル [mol] あたり (1 原子, 1 分子) の自由エネルギーである化学ポテンシャル μ_i は、バルク中の原子数を n_i とすると

$$\mu_i = \frac{E_{i(\text{bulk})}}{n_i} \quad (1)$$

そして、 $E_{\text{SiC}(\text{slab})}$ と、バルクモデル中の 1 原子当たりのエネルギーの総和との差を取る事で、表面エネルギー E_{surface} を算出する。

$$E_{\text{surface}} = E_{\text{SiC}(\text{slab})} - \sum n_i \mu_i \quad (2)$$

1.1.3 結論

計算結果より、Si-rich, C-rich, 両環境において、SiC の多形ごと、表面ごとの表面エネルギーをそれぞれ図 2 にまとめた。(a) より、Si-rich 環境下では、3C, 4H, 6H といった多形に応じた大きな変化は見られないが(0001) 面が最も安定している事が分かる。一方で、(b) より、C-rich 環境下では、Si-rich 同様、多形に応じた変化は見られないが、(0001) 面が最も不安定である事が分かる。

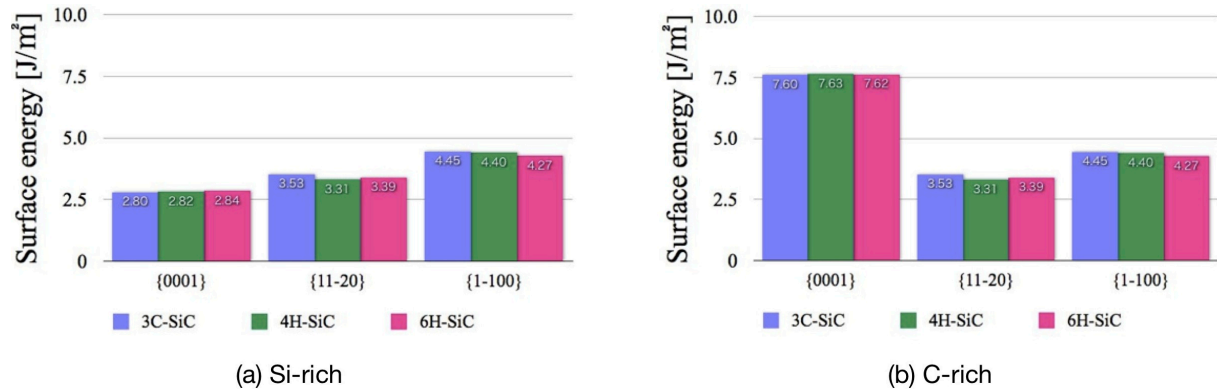


図 2: SiC の多形ごと、表面ごとの表面エネルギー

実際に、SiC 単結晶のマイクロパイプ欠陥周辺で環境の違いにより、どのように結晶成長しているのかを図 4 に示す。(a) に示したように SiC 単結晶の (0001) 面上にマイクロパイプ欠陥がある。ここで、(b) のようにマイクロパイプ欠陥周辺にきた拡散原子がどのように結晶を成長させるかを見ていく。Si-rich の場合、(0001) 面が最安定である為、拡散原子がマイクロパイプ欠陥を塞ぐように取り込まれ、すぐ覆われてしまう。その様相を (c) に示した。一方、C-rich の場合、(0001) 面に直行する面が最安定である為、拡散原子が穴を大きくするように取り込まれ、マイクロパイプ欠陥が残ってしまう。その様相を (d) に示した。

本計算結果より、マイクロパイプ欠陥の有無は成長環境の違いによるものだけではなく、表面エネルギーが深く関わり、単結晶の外形を決定づける要因になっていた事が分かった。

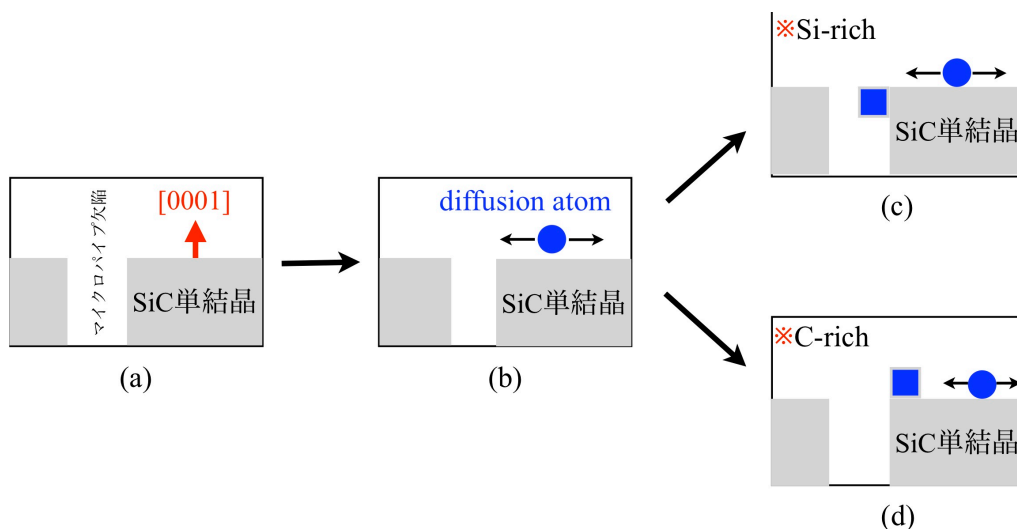


図 3: 表面エネルギーに依存したマイクロパイプ欠陥の生成モデル